



## ПРОСПЕКТ СВОБОДНЫЙ-2015

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ СТУДЕНТОВ,  
АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

ЭЛЕКТРОННЫЙ СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ  
МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ,  
АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ  
**«ПРОСПЕКТ СВОБОДНЫЙ-2015»**,  
ПОСВЯЩЕННОЙ 70-ЛЕТИЮ ВЕЛИКОЙ ПОБЕДЫ

КРАСНОЯРСК, СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

15-25 АПРЕЛЯ 2015 Г.

Министерство образования и науки Российской Федерации  
ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет»

Сборник материалов  
Международной конференции студентов,  
аспирантов и молодых ученых  
«Перспектив Свободный-2015»,  
посвященной 70-летию Великой Победы

Красноярск, Сибирский федеральный университет, 15-25 апреля 2015 г.

Красноярск, 2015.

**«Физика конденсированного состояния»**

## SPECTROSCOPIC MAGNETO-ELLIPSONOMETRY FOR STUDYING MAGNETO-OPTICAL PROPERTIES OF SINGLE-LAYER FERROMAGNETIC NANOSTRUCTURES

Maximova O.A.<sup>1,2</sup>, Kosyrev N.N.<sup>1</sup>,

scientific advisor – Doctor of Science Ovchinnikov S.G.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Kirenskiy Institute of Physics of the SB RAS, <sup>2</sup> Siberian Federal University

**Abstract.** The elements of the dielectric tensor  $\varepsilon$  are the subject of interest. In this paper a new method for obtaining diagonal and off-diagonal elements of this tensor is presented. In situ spectroscopic ellipsometry and magneto-ellipsometry measurements data from the in situ molecular beam epitaxy setup with an integrated magneto-ellipsometric real time control are used. The formulae and the algorithm for data analysis are obtained. The method is approved on the ferromagnetic nanostructures Fe/SiO<sub>2</sub>/Si.

### 1. Introduction

Recently spintronics has become one of the most important scientific areas, but it cannot develop without in situ high-precision real-time process control of technology. One of the methods of spintronics devices fabrication is an ultrahigh-vacuum thermal evaporation. One can use ellipsometry technique to obtain data on optical and structural properties. It is a non-destructive method of control, and if we also have to control magneto-optical properties in situ, it would be great to use another non-destructive technique, i.e. magneto-ellipsometry. It combines standard ellipsometry and transverse magneto-optical Kerr effect measurements. It is a really powerful optical technique, as it can be used for simultaneous, precise, in situ control of magnetic, structural, and optical properties of nanomaterials in the process of deposition in the high-vacuum chamber [1].

We managed to make a set-up and a software for it, so that we can analyse the data.

In this paper we present the basic principles of magneto-ellipsometry and the way of data analysis, i.e. necessary formulae and algorithm. At the end we demonstrate this procedure on the Fe/SiO<sub>2</sub>/Si nanostructures, which are used in spintronics devices [2].

### 2. Experiment

In this work the solution of the inverse ellipsometric problem under the influence of an external magnetic field in the equatorial magneto-optical Kerr effect configuration in the visible range is presented. The single-layer model of reflecting ferromagnetic nanostructures is considered here (see [3] for the model of a homogeneous semi-infinite medium). This is necessary for analysis of ellipsometry and magneto-ellipsometry data that are obtained during in situ measurements. Hence all elements of dielectric tensor of a ferromagnetic material are calculated. Diagonal elements of this tensor give information about refractive and absorbance indices, and off-diagonal elements about magneto-optical effects by means of magneto-optical parameter  $Q$  depending on the object magnetization.

In experiment ellipsometric angles are measured. Those which correspond to zero magnetization ( $Q=0$ ) are denoted by  $\psi_0, \Delta_0$ . Those which correspond to the non-zero magnetization (when  $Q=Q_1-iQ_2 \neq 0$ ) are denoted by  $\psi_0+\delta\psi, \Delta_0+\delta\Delta$ , as due to transverse magneto-optical Kerr effect the ellipsometric angles corrections  $\delta\psi$  and  $\delta\Delta$  appear.

Figure 1 shows the diagram of a single-layer model, where 0 – ambient, 1 – ferromagnetic metal of  $d$  thickness, 2 – substrate. Angles  $\varphi_0, \varphi_1$  and  $\varphi_2$  are related by Snell law of refraction.



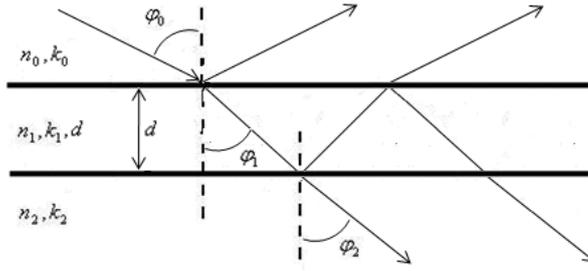


Fig. 1. Single-layer model

When a single-layer model is used, the values of refractive ( $n_1$ ) and absorbance indices ( $k_1$ ) of the material ( $N_1 = n_1 - ik_1$ ) are calculated by Nelder–Mead minimization of the ellipsometric angles  $\psi_0, \Delta_0$ . This complex refractive index  $N_1$  and the complex refractive indices of the ambient ( $N_0 = n_0 - ik_0$ ) are used for calculation of magneto-optical parameter  $Q$ .

The basic equation of ellipsometry is used for obtaining information on complex reflection indices corresponding to p- and s-polarization. The idea is to present real ( $R'_p$  and  $R'_s$ ) and imaginary ( $R''_p$  and  $R''_s$ ) parts of a numerator and a denominator in an explicit form [3]:

$$tg\psi \exp(i\Delta) = \frac{R_p(Q)}{R_s} = \frac{R'_p - iR''_p}{R'_s - iR''_s}. \quad (1)$$

Complex reflection indices for a single-layer model:

$$R_p = r_{01p} + \frac{t_{01p}t_{10p}r_{12p} \exp(-i2\beta)}{1 - r_{10p}r_{12p} \exp(-i2\beta)}, \quad (2)$$

$$R_s = \frac{r_{01s} + r_{12s} \exp(-i2\beta)}{1 + r_{01s}r_{12s} \exp(-i2\beta)}, \quad (3)$$

where  $r_{01p}$ ,  $r_{01s}$  and  $r_{12p}$ ,  $r_{12s}$  are reflection indices for boundaries 0-1 and 1-2, respectively,  $t_{01p}$  and  $t_{10p}$  are transmission coefficients. Coefficients  $r_{01p}$  and  $t_{01p}$  correspond to direction of wave propagation from medium 0 into medium 1, while  $r_{10p}$  and  $t_{10p}$  – backwards.

The next step is to distinguish magnetic field contribution and denote it as  $R''_{p1}$  and  $R''_{s1}$  for imaginary parts of reflection coefficients, and  $R'_{p1}$  and  $R'_{s1}$  for real parts of reflection coefficients, and non-magnetic summands  $R'_{p0}$ ,  $R'_{s0}$ ,  $R''_{p0}$  and  $R''_{s0}$ :

$$R_p = R'_{p0} + R'_{p1} - i(R''_{p0} + R''_{p1}), \quad (4)$$

$$R_s = R'_{s0} = R'_{s0} - iR''_{s0}. \quad (5)$$

In view of (1-5) we can write:

$$r_{01s} = (R'_{s0})_{01} - i(R''_{s0})_{01}, \quad (6)$$

$$r_{12s} = (R'_{s0})_{12} - i(R''_{s0})_{12}, \quad (7)$$

$$r_{01p} = (R'_{p0})_{01} + (R'_{p1})_{01} - i((R''_{p0})_{01} + (R''_{p1})_{01}), \quad (8)$$

$$r_{12p} = (R'_{p0})_{12} + (R'_{p1})_{12} - i((R''_{p0})_{12} + (R''_{p1})_{12}), \quad (9)$$

$$r_{10p} = (R'_{p0})_{10} + (R'_{p1})_{10} - i((R''_{p0})_{10} + (R''_{p1})_{10}), \quad (10)$$

$$t_{01p} = (T'_{p0})_{01} + (T'_{p1})_{01} - i((T''_{p0})_{01} + (T''_{p1})_{01}), \quad (11)$$

$$t_{10p} = (T'_{p0})_{10} + (T'_{p1})_{10} - i((T''_{p0})_{10} + (T''_{p1})_{10}), \quad (12)$$

where  $(R'_{s0})_{01}$ ,  $(R''_{s0})_{01}$ ,  $(R'_{p0})_{01}$ ,  $(R''_{p0})_{01}$ ,  $(R'_{p1})_{01}$ ,  $(R''_{p1})_{01}$  are  $R'_{s0}$ ,  $R''_{s0}$ ,  $R'_{p0}$ ,  $R''_{p0}$ ,  $R'_{p1}$ ,  $R''_{p1}$  in the model of a homogeneous semi-infinite medium. Subindex 01 is used when a wave incidents from ambient onto layer 1, subindex 12 from layer 1 onto substrate (2).  $(R'_{p0})_{10}$ ,  $(R''_{p0})_{10}$ ,  $(R'_{p1})_{10}$ ,  $(R''_{p1})_{10}$  describe the wave propagation from from medium 1 into medium 0.  $(T'_{p0})_{01}$ ,  $(T''_{p0})_{01}$ ,  $(T'_{p1})_{01}$ ,  $(T''_{p1})_{01}$  are calculated as transmission coefficients.

Thus on substituting (2-12) into (1) the expressions for calculation of ellipsometric angles  $\delta\psi$ ,  $\delta\Delta$  corresponding to the non-zero magnetization are obtained.

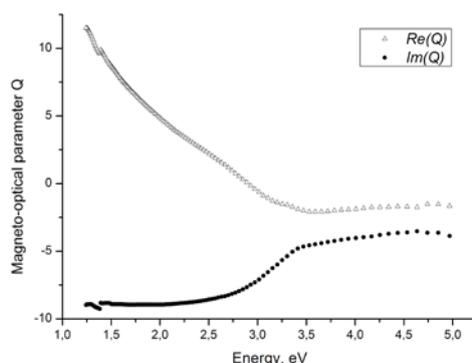
Table I demonstrates the flowchart of the data analysis.

**Table I.** The Data Analysis

Action	Result
<i>Spectral ellipsometry (SE) and surface magneto-optical Kerr effect (SMOKE) measurements</i>	$\psi_0$ $(\lambda), \Delta_0(\lambda)$ $\delta\psi$ $(\lambda), \delta\Delta(\lambda)$
<i>The calculation of spectral dependences of the refractive (n) and absorbance indices (k)</i>	$n(\lambda), k(\lambda)$
<i>Theoretical calculation of the ellipsometric angles</i>	$\delta\psi(\lambda), \delta\Delta(\lambda)$
<i>Nelder–Mead minimization in order to give the best fit to the experimental data</i>	$Q_1(\lambda), Q_2(\lambda)$

### 3. Results and discussions

Fe/SiO<sub>2</sub>/Si nanostructure was formed. According to the in situ spectroscopic ellipsometry measurements of ellipsometric parameters  $\psi$  and  $\Delta$  during Fe deposition, thickness of the Fe layer was 20.0 nm after deposition, the thickness of the SiO<sub>2</sub> layer was ~ 3.84 nm. The in situ measurements of the magneto-optical Kerr effect were carried out during Fe deposition under the magnetization reversal of the sample in the  $\pm 2$ kOe field. The data were analyzed according to the algorithm for a single-layer model from table I. The values of SiO<sub>2</sub> and Si complex refraction indices were taken from the experimental work [4]. Eventually, the spectral dependences of refractive and absorbance indices of Fe, the values of real ( $Q_1$ ) and imaginary parts ( $Q_2$ ) of magneto-optical parameter  $Q$  have been calculated. On figure 2 the spectral dependence of magneto-optical parameter  $Q$  is demonstrated. We can see that our method is applicable, as our results are in good agreement with [5].



**Fig. 2.** Magneto-optical parameter  $Q$



#### 4. Conclusions

The expressions for analyzing ellipsometry ( $\psi_0$  and  $\Delta_0$ ) and magneto-ellipsometry ( $\psi_0 + \delta\psi$  and  $\Delta_0 + \delta\Delta$ ) data for a single-layer model are obtained and used for calculating of the values of refractive ( $n$ ) and absorbance indices ( $k$ ) of the ferromagnetic metal Fe in a thin nanostructure Fe/SiO<sub>2</sub>/Si, as well as the values of real ( $Q_1$ ) and imaginary parts ( $Q_2$ ) of magneto-optical parameter  $Q$ . Thus the opportunity of simultaneous characterization of nanostructures optical and magneto-optical properties by means of magneto-ellipsometry is demonstrated.

#### Acknowledgements

The work was supported by the Program of the President of the Russian Federation for the support of leading scientific schools (Scientific School 2886.2014.2), RFBR (grant No. 13-02-01265, No. 14-02-01211), the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Agreement 14.604.21.0002 (RFMEFI60414X0002), State contract No. 02.G25.31.0043 and State task No. 16.663.2014K)

#### References

1. Measuring and growth complex for synthesis and study of in situ materials for spintronics / S. V. Rykhlitskii, V. A. Shvets, E. V. Spesivtsev et al. // Prib. Tekh. Eksp. – 2012. – No. 2. – P. 165–166.
2. Magnetic-field- and bias-sensitive conductivity of a hybrid Fe/SiO<sub>2</sub>/p-Si structure in planar geometry / N. V. Volkov, A. S. Tarasov, E. V. Eremin et al. // JOURNAL OF APPLIED PHYSICS. – 2011. – V. 109. – P. 123924–123924-8.
3. Magnetic contribution to Fresnel coefficients at magnetoellipsometric investigation / O.A. Maximova, S.G. Ovchinnikov, U. Hartmann et al. // Vestnik SibGAU. – 2013. – V. 49. – N 3. – P. 212–217.
4. Johnson P.B., Christy R.W. Optical constants of transition metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and Pd / P.B. Johnson, R.W. Christy // PHYS. REV. – 1974. – V. 9. – N. 12. – P. 5056–5070.
5. Krinchik G.S. Magneto-optics of ferromagnetic metals / G.S. Krinchik // Proceedings of the Academy of Sciences of the USSR. – 1964. – V. 28. – N. 3. – P. 481–488.



## СИММЕТРИЯ КОНУСОВ НУЛЕВОГО ТЕПЛОВОГО РАСШИРЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

Замковская А.И., Максимова Е.М.

научный руководитель канд. физ.-мат. наук Максимова Е.М.

*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского*

Для практического применения кристаллов особенно важно определение направлений, в которых данное свойство кристалла принимает максимальное, минимальное или равное нулю значение. Такие задачи возникают во всех разделах кристаллофизики. Предлагается один из методов их решения на примере теплового расширения кристаллов.

Количественно, тепловое расширение характеризуется температурным коэффициентом линейного расширения  $\alpha_n$ , равным отношению относительного изменения длины тела вдоль рассматриваемого направления, при изобарическом нагревании тела, к приращению температуры [1]:

$$\alpha_n = \frac{\Delta l/l}{\Delta T}$$

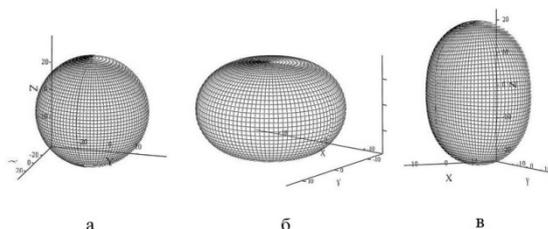
Воздействие температуры одинаково во всех направлениях (скалярно), поэтому термические деформации кристаллов определяются их структурой и описываются симметричным тензором второго ранга.

При определенном выборе системы координат (выбор определен правилами установки и привязан к элементам симметрии данного кристалла), количество независимых коэффициентов  $\alpha_{ij}$  уменьшается. Величина коэффициента теплового расширения в произвольном направлении [2]:

$$\alpha_n = \sum \alpha_{ij} \cdot n_i \cdot n_j$$

где  $n_i, n_j$  – компоненты единичного вектора, определяющего выбранное направление;  $i, j$  принимают значения  $x, y, z$ .

Тепловые свойства кристаллов можно визуализировать с помощью указательных поверхностей теплового расширения. Радиус-вектор такой поверхности пропорционален относительному удлинению кристалла вдоль этого направления при равномерном нагревании. Вид и ориентация поверхности коэффициентов теплового расширения зависит от симметрии кристалла в соответствии с принципом Неймана. Так, для кристаллов высшей категории указательная поверхность имеет вид сферы, для средней категории – эллипсоида вращения, для низшей категории – трехосного эллипсоида, рис.1.



*Рисунок 1. Указательная поверхность теплового расширения для кристаллов: высшей (а), средней (б) и низшей (в) категорий симметрии.*

Со времен открытия Э. Митчерлихом сжатия при нагревании кристаллов кальцита  $\text{CaCO}_3$  в плоскости (0001), отрицательное линейное тепловое расширение рассматривалось как явление редкое и аномальное. Однако с накоплением экспериментального материала представление об уникальности отрицательного линейного теплового расширения подтвердилось только для кубических кристаллов. Для кристаллов средней категории и ромбических кристаллов из низшей категории оказалось, что отрицательное линейное тепловое расширение не является редкостью – несколько процентов таких соединений проявляют это свойство. Что касается моноклинных и триклинных кристаллов низшей категории, то, по крайней мере, третья часть в них испытывает сжатие по отдельным направлениям при нагревании, т.е. отрицательное линейное тепловое расширение таких (косоугольных кристаллов) является не исключением, а скорее нормой.

Указательные поверхности теплового расширения кристаллов с отрицательными коэффициентами (кальцит, графит, гидроксиапатит и др.) – это многополостные поверхности с положительными и отрицательными частями. В таких кристаллах существуют направления, не подверженные изменению линейных размеров при воздействии температуры – конусы нулевого расширения, рис.2.

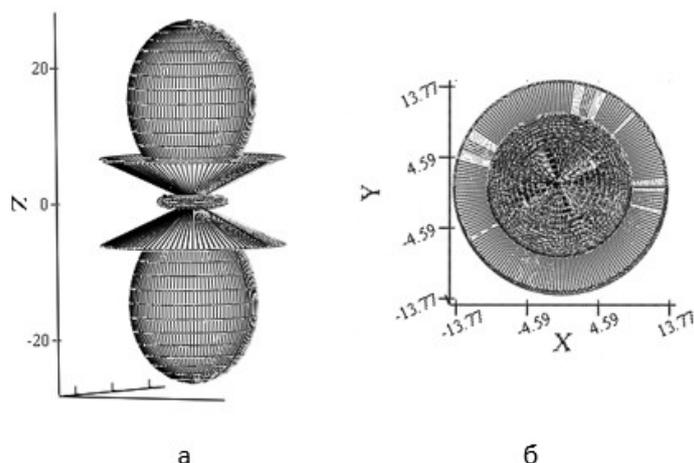


Рисунок 2. Указательная поверхность теплового расширения кристалла кальцита с конусом нулевого расширения (а), проекция поверхности и конуса на плоскость (XOY), (б).

Вдоль оси Z тепловое расширение кальцита максимально. Стержень из кальцита, вырезанный вдоль этой оси обладает максимальным удлинением при нагревании. Перпендикулярно к оси третьего порядка - область отрицательного теплового расширения, т.е. сжатия. Стержень, вырезанный из кристалла вдоль этого направления, при нагревании будет максимально сокращаться. Вокруг оси Z (оси симметрии 3-го порядка) построен конус направлений с углом полураствора  $75^{\circ}56'$ , вдоль которых расширение (сжатие) нулевое. Стержень из кальцита, вырезанный вдоль этого направления не будет изменять своих размеров при нагревании.

Симметрия конусов нулевого расширения зависит от симметрии кристаллов. Для кристаллов средней категории – это круговые конусы с предельной группой симметрии  $\infty m$ . В основании конусов нулевого расширения кристаллов низшей категории лежат эллипсы, группа симметрии таких конусов –  $2m$ .

Ниже приводятся указательные поверхности теплового расширения и конусы нулевого расширения для кристаллов низшей категории, рис.3., рис.4.

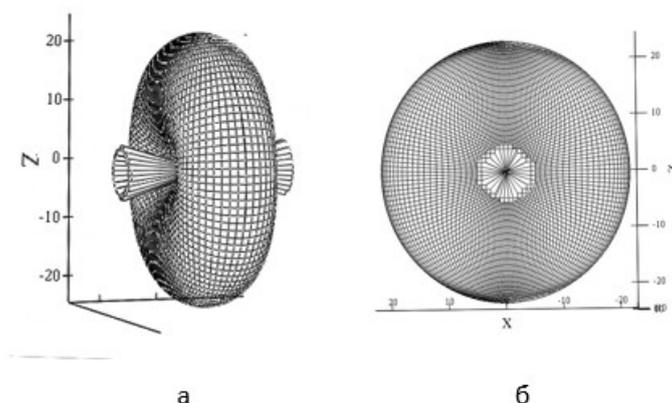


Рисунок 3. Указательная поверхность теплового расширения ромбического кристалла  $\alpha$ -урана с конусом нулевого расширения (а), проекция поверхности и конуса на плоскость (XOZ), (б).

Высота конуса нулевого расширения является осью Y, совпадающей, по правилам выбора системы координат кристаллах этой системы с одной из осей симметрии 2-го порядка или с перпендикуляром к плоскости симметрии.

На рис.4 изображена поверхность теплового расширения с конусом нулевого расширения для кристалла этилендиаминтарtrate, принадлежащего к моноклинной системе.

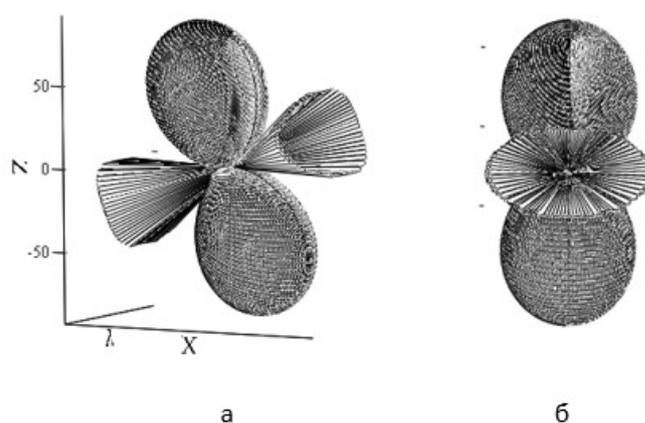


Рисунок 4. Указательная поверхность теплового расширения кристалла этилендиаминтартата с конусом нулевого расширения (а), проекция поверхности и конуса на плоскость, перпендикулярную высоте конуса.

Материалы с нулевым тепловым расширением по широкому температурному ряду находят широкое практическое применение в высокоточном машиностроении.

## КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Иванцов Илья Дмитриевич

Научный руководитель д.ф.-м.н. Овчинников Сергей Геннадьевич

Сибирский федеральный университет

Точное решение модели Изинга в двумерном случае [1,2] сыграло важнейшую роль в построении теории фазовых переходов, продемонстрировав резкое отличие от теории Ландау. В данной работе рассматриваются уравнения, полученные методом двухвременной функции Грина, что позволяет найти точные функции Грина для любой размерности и получить соотношения на корреляционные функции без использования статистической суммы. В случае модели Изинга бесконечная цепочка уравнений, связывающих между собой функции Грина различного порядка, расцепляется естественным образом без применения каких-либо приближений, что дает возможность найти точные соотношения для корреляционных функций. Гамильтониан модели Изинга:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{fg} J_{fg} S_f^z S_g^z - \mu \sum_f S_f^z, (1)$$

где  $S_f^z$  - проекция спина на узле  $f$ ,  $J_{fg} = J$  для ближайших соседей и равно нулю для всех остальных,  $\mu$  – внешнее поле. Тогда уравнение движения для функции Грина будет иметь вид

$$E \langle \langle S_f^+ A | S_g^- \rangle \rangle = \delta_{fg} \langle [S_f^+ A, S_g^-] \rangle + \langle \langle [S_f^+ A, H] | S_g^- \rangle \rangle, (2)$$

где  $A$  – произвольный оператор, коммутирующий с  $H$ . Уравнения расцепляются за счет соотношения

$$\prod_{n=-d}^d (\sigma_f + n) = 0, (3)$$

где  $\sigma_f = \sum_{\delta} S_{f+\delta}^z$ ,  $\delta$  – индекс ближайших соседей. Таким образом получается система из  $d+1$  уравнений [3]. В матричном виде:

$$\sum_n T_{mn} \langle \sigma_f^n A \rangle = 2 \langle S_f^z \sigma_f^m A \rangle \quad T = VPV^{-1} (4)$$

$$P_{mn} = \text{th}(\beta(\mu + mJ)) \quad V_{mn} = (-m)^n \quad m = -d \dots d, \quad n = 0 \dots 2d. (5)$$

Специальный вид матрицы  $T$  позволяет перейти к уравнениям на средние, описывающие модель Изинга произвольной размерности, а зависимость от числа измерений реализуется в соотношении (3):

$$2 \langle S_f^z A \rangle = \langle \text{th}(\beta(\mu + J\sigma_f)) A \rangle. (6)$$

В одномерном случае соотношение (3) имеет вид  $\sigma_f^3 = \sigma_f$ , за счет чего уравнение (6) при отсутствии магнитного поля можно преобразовать к виду

$$2 \langle S_f^z A \rangle = \text{th}(\beta J) \langle \sigma_f A \rangle, (7)$$

откуда получается известное выражение для коррелятора:  $4 \langle S_f^z S_{f+k}^z \rangle = \text{th}^k(\beta J / 2)$ .

В случае размерности  $d > 1$  представим оператор  $\sigma_f$  в виде суперпозиции операторов Хаббарда

$$\sigma_f = \sum_{n=1}^d n (X_f^{n,n} - X_f^{-n,-n}). (8)$$



Рассмотрим систему без магнитного поля. В таком случае уравнение (6) можно переписать в виде

$$2\langle S_f^z A \rangle = \sum_{n=1}^d \text{th}(n\beta J) \langle (X_f^{n,n} - X_f^{-n,-n}) A \rangle. (9)$$

В пределе  $d \rightarrow \infty$  уравнение переходит в приближение среднего поля ( $A=1$ ).

$$\langle (X_f^{n,n} - X_f^{-n,-n}) \rangle = \delta(n - 2d \langle S_f^z \rangle), (10)$$

$$2\langle S_f^z \rangle = \text{th}(2\beta J d \langle S_f^z \rangle), (11)$$

что соответствует уравнению для намагниченности в приближении среднего поля.

В двумерном случае уравнение (6) имеет вид ( $A = S_{f+k}^z$ )

$$2\langle S_f^z S_{f+k}^z \rangle = \text{th}(\beta J) \langle \sigma_f S_{f+k}^z \rangle + (\text{th}(2\beta J) - 2 \text{th}(\beta J)) \langle (X_f^{2,2} - X_f^{-2,-2}) S_{f+k}^z \rangle. (12)$$

Будем рассматривать корреляторы в пределе  $k \rightarrow \infty$ . В таком случае корреляторы равны

$$\langle S_f^z S_{f+k}^z \rangle \sim C(T) \exp(\lambda(T)k), \quad \langle (X_f^{2,2} - X_f^{-2,-2}) S_{f+k}^z \rangle \sim C_1(T) \exp(\lambda(T)k) (13)$$

Определив вид функции  $C_1(T)/C(T)$  вблизи точки  $T_c$  уравнение (12) преобразуется к уравнению на  $\lambda$ . Решением такого уравнения будет:

$$\lambda(T) = \text{arcch} \left( \frac{1}{a(T)} - 1 \right), \quad a(T) = \text{th}(\beta J) + C_1(T)/C(T) (\text{th}(2\beta J) - 2 \text{th}(\beta J)) (14)$$

Найденная функция соответствует корреляционному радиусу вблизи  $T_c$  и пределе  $k \rightarrow \infty$ .  $\lambda$  является обратным корреляционным радиусом, и значение  $T$ , при котором  $\lambda=0$  соответствует  $T_c$ , а разложив  $\lambda$  вблизи  $T_c$  найдем критический индекс  $\nu$ . Полученное значение критической температуры и критический индекс  $\nu$  соответствуют известным значениям, полученным из точного решения, и равны:

$$T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}), \quad \nu = 1. (15)$$

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 14-12-00061.

### Список публикаций

- [1] L. Onsager, Phys. Rev., Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition, 65(1944), 117-149.
- [2] C. N. Yang, Phys. Rev., The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model, 85(1952), 808-816.
- [3] М.П. Желифонов, ТМФ, 8, 401, 1971.



**ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТО-ОПТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ КРИВЫХ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ ОБМЕННО-СВЯЗАННЫХ СТРУКТУР CoP/NiCoP****Комаров В.А.****научный руководитель д-р физ.-мат. наук Патрин Г.С.***Сибирский Федеральный Университет*

Обменно-связанные магнитопленочные структуры, содержащие магнитомягкие и магнито жесткие слои, имеют большой научный и прикладной интерес [1–4]. В последнее время наряду с исследованием свойств ферро-антиферромагнитных и ферро-ферромагнитных структур привлекают внимание ферро-ферромагнитные обменно-связанные пленочные структуры. Это связано с тем фактом, что в них обнаружены иные процессы перемагничивания [5,6]. Для адекватного описания свойств таких материалов требуются дальнейшие исследования, включающие в себя расширение как используемых методов контроля свойств, так и круга изучаемых материалов. С точки зрения расширения методов анализа таких структур представляет интерес изучение механизмов перемагничивания отдельно каждого слоя, например, с использованием магнитооптических эффектов, а также детальное исследование эффектов сдвига частной петли гистерезиса при перемагничивании только магнитомягкого слоя.

В настоящей работе проведены исследования кривых перемагничивания двухслойной ферро-ферромагнитной структуры, содержащей магнито жесткий слой (CoP) и магнитомягкий слой (CoNiP) различной толщины, в зависимости от толщины магнитомягкого слоя при фиксированной толщине магнито жесткого слоя.

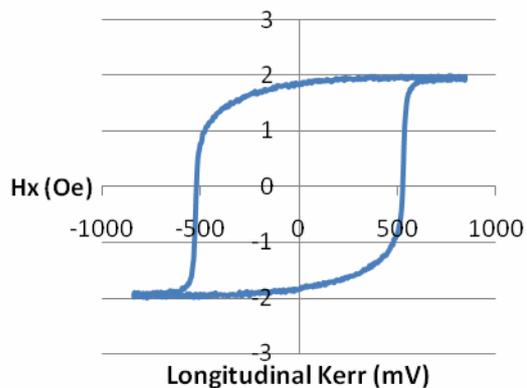
Слои CoP были получены методом химического осаждения. Пленки CoP с содержанием P ~ 2.5wt.% при толщинах < 50 nm имеют мелкокристаллическую структуру. Намагниченность насыщения  $M_s \sim 1400G$ . Образцы изотропны в плоскости и имеют коэрцитивность  $H_C > 1000Oe$ . Слои CoNiP также получались методом химического осаждения. Петли гистерезиса снимались с использованием меридионального эффекта Керра на магнитооптическом магнетометре NanoMoke 2. При этом с помощью магнитооптического эффекта Керра петли снимались с каждого слоя структуры, что позволяет получить дополнительную информацию о механизмах их перемагничивания. Все измерения проводились при комнатной температуре. Толщина слоя CoP составила 60 nm. Диапазон вариации толщины слоев CoNiP составлял 10–150 nm.

В ходе эксперимента были получены кривые перемагничивания обменно-связанных структур CoP/NiCoP. Толщина слоя CoP 60 nm, NiCoP 10,20,30,40,50,60,80,100,150nm (рис.5). По кривым была найдена коэрцитивная сила и поле смещения и построена их зависимость от толщины магнитомягкого слоя (рис.6-7).

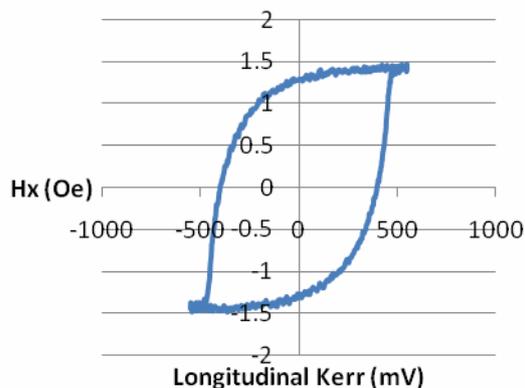
Как видно из рис. 5, смещенные петли гистерезиса обнаруживаются при толщине магнитомягкого слоя 40 nm и сохраняются до толщины 150 nm. При этом при толщине магнитомягкого слоя 80 nm и выше коэрцитивная сила не зависит от толщины. Зависимость поля смещения от толщины магнитомягкого носит более сложный характер.



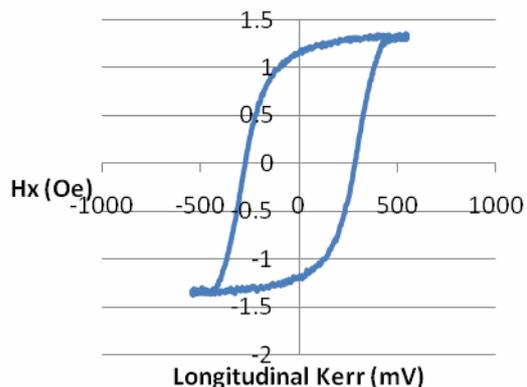
**CoP 60nm NiCoP  
10nm**



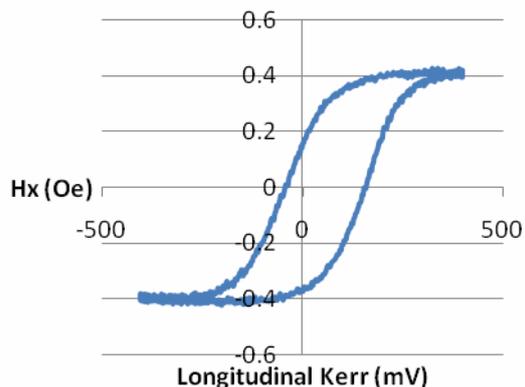
**CoP 60nm NiCoP  
20nm**



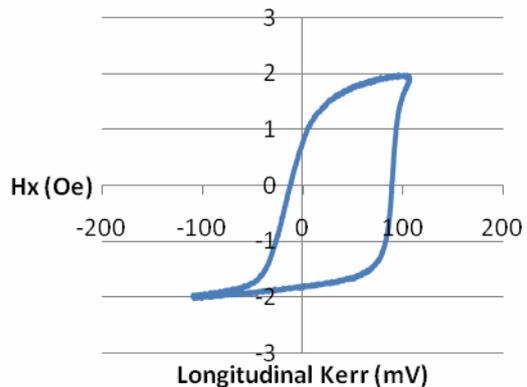
**CoP 60nm NiCoP  
30nm**



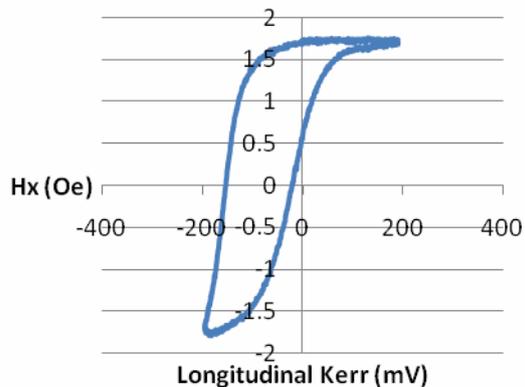
**CoP 60nm NiCoP  
40nm**



**CoP 60nm NiCoP  
80nm**



**CoP 60nm NiCoP  
50nm**



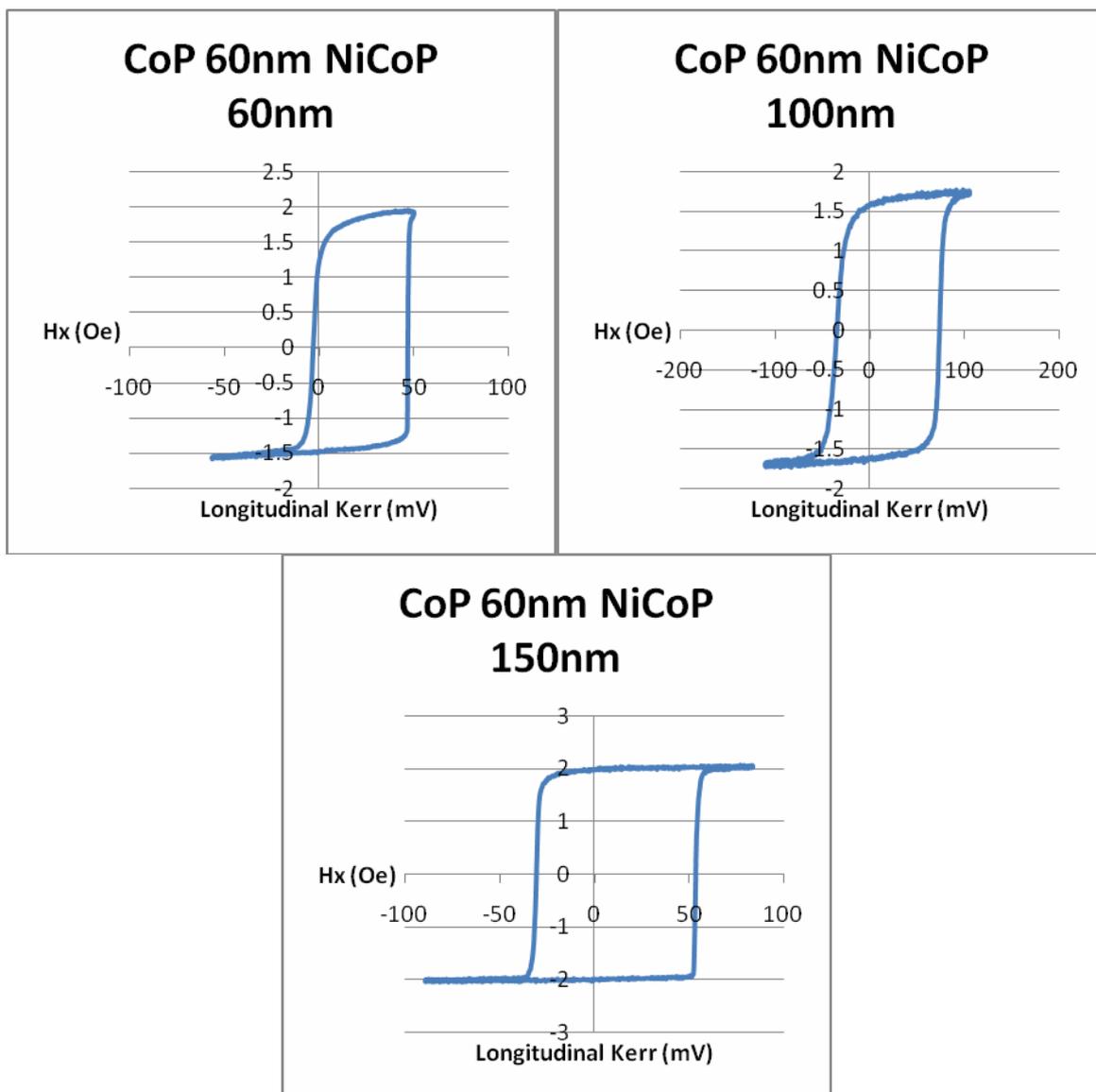


Рис.5. Кривые перемагничивания двухслойных структур  $\text{CoP}/\text{NiCoP}$  с различной толщиной магнитомягкого слоя

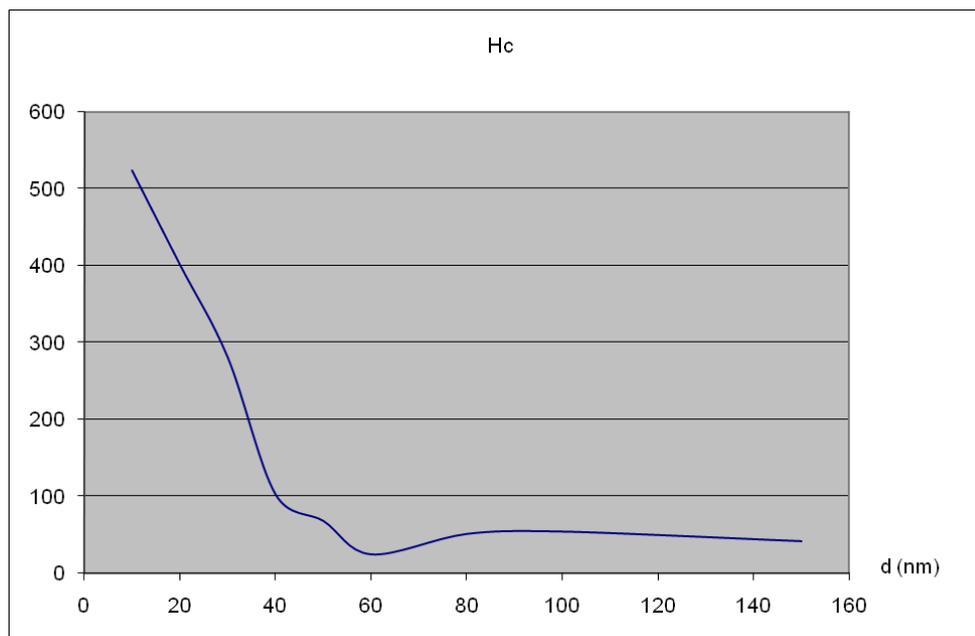


Рис.6 Зависимость коэрцитивной силы от толщины магнитомягкого слоя

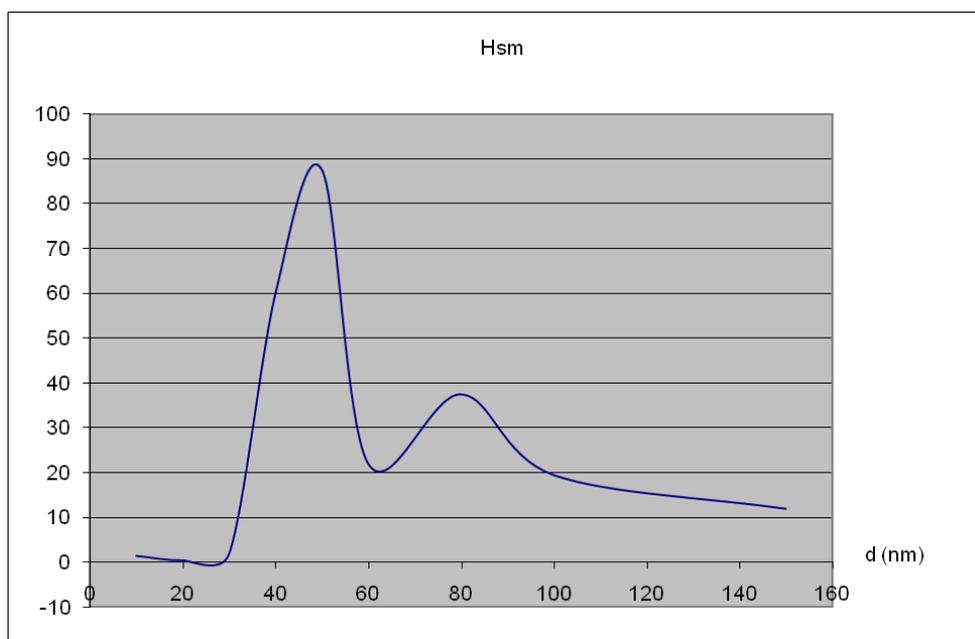


Рис.7. Зависимость поля смещения от толщины магнитомягкого слоя

### Список литературы

1. Fullerton, E.E. / E.E. Fullerton, J.S. Jiang, M. Grimsditch // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 12193.
2. Xi H. / H. Xi, R.M. White // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 80.
3. Кабанов, Ю.П. / Ю.П. Кабанов, В.С. Горнаков // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. С. 8.
4. Фролов, Г.И. / Г.И. Фролов, В.А. Середкин, В.Ю. Яковчук // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. С. 17.
5. Leineweber, T. / T. Leineweber, H. Kronmiller // J. Magn. Magn. Mater. 1997. V. 176. P. 145.
6. Yan, S. / S. Yan, J.A. Barnard, F. Xu // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 184 403.



7.Goto, E. / E. Goto, N. Hayashi, T. Miyashita, K. Nakagawa // J. Appl. Phys. 1965.  
V. 36.P. 2951.



## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ АТОМОВ БОРА В ПЛАЗМЕННОЙ СТРУЕ ХОЛЛОВСКОГО ДВИГАТЕЛЯ МЕТОДОМ ПАССИВНОЙ ДИАГНОСТИКИ

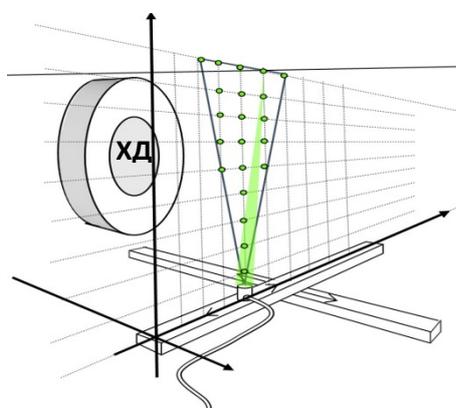
Криворучко Д.Д.

научный руководитель д-р техн. наук Горшков О.А.

*Московский физико-технический институт*

Классическими значениями величины тяги для электрических ракетных двигателей (ЭРД) являются 15-800 мН [1], поэтому для создания требуемого воздействия на космический аппарат необходимо значительное время работы. Таким образом, для ЭРД одной из ключевых характеристик является - огневой ресурс. При разработке новых ЭРД очень важно, как можно точнее, предсказать (определить численными или аналитическими методами) их время жизни, поскольку прямое подтверждение ресурса возможно только в ходе наземных ресурсных испытаний, длительность и стоимость которых, особенно, для мощных ЭРД, крайне велика.

Современная космическая авиация из всех классов ЭРД, преимущественно использует ионные (ИД) и холловские двигатели (ХД). Ресурс ХД и ИД напрямую связан с эрозией их элементов (керамических изоляторов, сеток, катодов). В ХД эрозия разрядной камеры приводит к появлению примесных частиц в плазменной струе ускорителя. Хотя поток этих частиц не велик, из-за низкой скорости распыления керамики, есть возможность зафиксировать их спектральные линии в спектре излучения струи ускорителя. Это позволяет, используя спектроскопические методы определять скорость эрозии разрядной камеры ХД в режиме реального времени. За рубежом существует много работ по исследованию параметров струи и эрозии ЭРД с помощью активной лазерной спектроскопии. Но эти способы диагностирования крайне дорогостоящие и требуют высококвалифицированного персонала, что затрудняет их внедрение на производство. С другой стороны в России исследовались возможности пассивной диагностики плазменной струи холловского двигателя. В работе [2] авторы при помощи пассивной диагностики получили среднюю скорость эрозии. Но, на практике, этих данных, для определения огневого ресурса двигателя, не достаточно, так как распыление внутреннего и внешнего кольца происходит не равномерно. Для того, что бы учесть неравномерность распыления изоляторов холловского двигателя и рассчитать не только скорость эрозии, но и ее пространственное распределение, используется 2-ух осевой координатный стол смонтированный внутри вакуумной камеры (рис. 1).



*Рис. 1. Схем. изображение экспериментальной установки для измерения интенсивности излучения ХД*

На столе установлена трубка, в которую вмонтирован асферический коллиматор и многомодовое оптоволоконно. В качестве пространственного фильтра излучения используется комбинированная система, состоящая из узкоапертурного оптоволоконного кабеля и поглощающего фильтра, представляющего собой непрозрачный на интересующей нас длине волны полый цилиндр.

Установление взаимосвязи между скоростью эрозии керамических колец ХД и интенсивностью излучения распыленного вещества решается в два

Установление взаимосвязи между скоростью эрозии керамических колец ХД и интенсивностью излучения распыленного вещества решается в два

этапа первый – определение концентрации распыляемых частиц, второй – связывание полученной величины со скоростью эрозии керамических изоляторов.

Так как поле концентраций атомов,  $n(z, p)$  бора в ХД можно считать цилиндрически-симметричным, а излучение атома равновероятным во все стороны, то зная интенсивность излучения газа на определенной длине волны вдоль последовательности прямых  $F(y)$ , можно с помощью обратного преобразования Абеля восстановить интенсивность излучения всей исследуемой области -  $I(r)$ .

Для оптически тонкой плазмы интенсивность спектральной линии  $I_{pq}$ , соответствующая переходу с уровня  $p$  на уровень  $q$ , может быть найдена по формуле:

$$I_{pq} = \frac{h\nu_{pq}}{4\pi} A_{pq} \int_0^{l_0} n(z, p) dl \quad (1)$$

где  $h$  – постоянная Планка,  $\nu_{pq}$  – частота перехода, а  $l_0$  – длина луча вдоль линии наблюдения,  $A_{pq}$  – коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения при переходе с уровня  $p$  на низлежащий уровень. Используя преобразование Абеля получаем следующее выражение:

$$\frac{h\nu_{pq}}{4\pi} A_{pq} n(z, p)(r) = -\frac{1}{\pi} \int_r^\infty \frac{dI_{pq}(y)}{dy} \frac{dy}{\sqrt{y^2 - r^2}} \quad (2)$$

где  $I_{pq}(y)$  – измеряемая интенсивность

излучения атомов бора вдоль направления  $x$ , в зависимости от координаты  $y$ .

В случае ХД эрозии преимущественно подвержена выходная часть разрядной камеры, в этой области находится катодная плазма, для описания которой традиционно прибегают к Корональной модели [3]. Исходя, из выбранной модели, справедлива следующая зависимость между концентрацией электронов  $n_e$  и ионов  $n(z, g)$ :

$$n_e n(z, g) Q_{ex}(g, p, T_e) = n(z, p) \sum_{q < p} A_{pq} \quad (3)$$

$$\frac{n(z+1, g)}{n(z, g)} = \frac{S(T_e, z, g)}{\alpha(T_e, z+1, g)}$$

где  $Q_{ex}(g, p, T_e) = \langle \sigma_{ex} v_e \rangle$  – коэффициент скорости возбуждения – произведение эффективного сечения  $\sigma$  и скорости электронов  $v_e$ ,  $S$  – коэффициент ударной ионизации,  $\alpha$  – коэффициент излучательной рекомбинации.

Перепишем данные соотношения для точки:

$$n_e(r) n(z, g)(r) Q_{ex}(g, p, T_e)(r) = n(z, p)(r) \sum_{q < p} A_{pq} \quad (4)$$

Из (3) и (4) имеем:

$$\frac{h\nu_{pq}}{4\pi} \sum_{q < p} A_{pq} n_e(r) n(z, g)(r) Q_{ex}(g, p, T_e)(r) = -\frac{1}{\pi} \int_r^\infty \frac{dI_{pq}(y)}{dy} \frac{dy}{\sqrt{y^2 - r^2}} \quad (5)$$

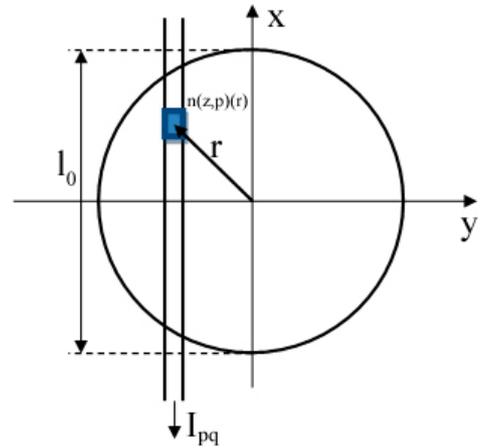


Рис.2. Графическая иллюстрация принятых обозначений

$$[F^{-1}(I_{pq})] = -\frac{1}{\pi} \int_r^{\infty} \frac{dI_{pq}(y)}{dy} \frac{dy}{\sqrt{y^2 - r^2}}$$

Обозначим:

Для установления взаимосвязи концентрации с интенсивностью необходима информация о концентрации и температуре электронов в области наблюдения, которые пока не представляется возможным измерить точно. Что бы избежать трудностей, связанных с недостатком эмпирических данных, используют метод, основанный на опорных спектральных линиях Хе. Берется не просто интенсивность излучения спектральных линий атомов бора, а ее отношение к интенсивности излучения спектральных линий атомов ксенона:

$$\frac{[F^{-1}(I_{spq}(z))]}{F^{-1}(I_{Xeij}(z))} = Const \frac{n_e n_s(z, g)(r) Q_{exs}(g, p, T_e)(r)}{n_e n_{Xe}(z, g)(r) Q_{exXe}(g, p, T_e)(r)} \quad (6)$$

где индекс s относится к бору, а Хе к ксенону. Используя в рамках данного метода преобразование Абеля, мы можем сократить концентрацию электронов, не прибегая к дополнительным допущениям о ее распределении и не переходя к фиктивным средним значениям  $n_s(sp)$  и  $n_{Xe}(cp)$ , как это было предложено в работах [2] и [4], что повышает точность модели:

$$\frac{[F^{-1}(I_{spq}(z))]}{F^{-1}(I_{Xeij}(z))} = Const \frac{n_s(z, g)(r) Q_{exs}(g, p, T_e)(r)}{n_{Xe}(z, g)(r) Q_{exXe}(g, p, T_e)(r)} \quad (7)$$

Указанный способ получения данных о профиле концентраций атомов бора, применим и в случае использования не Корональной модели, а улучшенной, Столкновительно-Излучательной модели, рассмотренной и дополненной в работе [5]. В ней авторы приводят следующее выражение для интенсивности ксенона

$$I_{Xe} = C_{Xe} \int_0^{s_0} n_{Xe} (n_e Q_{Xe}(f_e) + n_{XeII} Q'_{Xe} + n_{XeIII} Q''_{Xe}) dx \quad (8)$$

Можно показать, что данное выражение может быть приведено к следующему виду:

$$I_{Xe} = C_{Xe} \int_0^{\infty} n_{Xe} n_e (Q_{Xe} + Q'_{Xe} + \frac{p}{\sqrt{2}} Q''_{Xe}) dx = C_{Xe} \int_0^{\infty} n_{Xe} n_e \tilde{Q} dx, \quad (9)$$

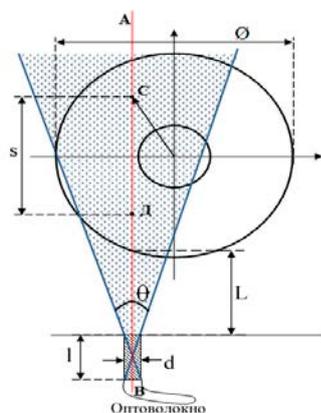


Рис.2 Конус собираемого излучения. Для наглядности, масштаб конус – двигатель утрирован.

Применяя к данным выражениям преобразование Абеля, можно полностью исключить концентрации электронов из дальнейшего рассмотрения без использования дополнительных приближений.

Стоит заметить, что на практике преобразование Абеля налагает определенные ограничения на способы измерения интенсивности. При выводе преобразования Абеля рассматривается интенсивность, собранная вдоль некой прямой АВ, т.е. на практике необходимо выделить интенсивность излучения с бесконечного тонкого цилиндра и только с параллельных выбранной линии направлений.

Другими словами, для правомерного применения преобразования Абеля телесный угол  $\theta = \frac{d}{l}$ , с которого



собирается излучение, должен быть мал по сравнению с телесным углом из которого виден весь срез двигателя, следовательно, должно выполняться соотношение  $d \ll \lambda$ . В данном случае, длина волны рассматриваемого излучения находится в двух диапазонах 700-850 и 200-300 нм, следовательно  $d \gg 0,8$  мкм, что выполняется для оптоволокна с которым мы работаем ( $d=100-500$  мкм). Таким образом, при  $d=500$  мкм и  $l=10$  см угол с которого мы будем собирать интенсивность

$$\theta = 2 \arctg \frac{500 \cdot 10^{-6}}{0,1} = 0,6^\circ$$

Непараллельность пучка в наконечнике, обусловленная конечным размером цилиндрической трубки, можно исправить, поставив дальше по направлению распространения излучения набор ахроматических линз.

Следующий шаг это – восстановление скорости эрозии изоляторов по данным о концентрации распыленного бора. Определив, углы падения ксенона на изоляторы и его энергии, находится количество атомов бора, выбитых с данной области изолятора в единицу времени, и их скорости. Предполагая прямолинейное распространение атомов бора, и зная их концентрацию в каждой точке, рассчитываем скорость эрозии изоляторов. Расстояние от среза двигателя, для которого верно предположение о прямолинейном распространении атомов распыляемого вещества, проверяется экспериментально. Так как после выбивания бор движется прямолинейно до столкновения, то на эксперименте при измерении интенсивности свечения бора хорошо различим конус. В той области, где частицы бора начинают претерпевать многочисленные столкновения, этот конус начнет «растущевываться». Таким образом, расстояние на котором излучение имеет четкие границы, можно считать областью прямолинейного распространения выбитых атомов. Сейчас ведутся работы по учету различных энергий Хе при выбивании атомов бора, а так же поиски других способов нахождения зависимости между концентрацией атомов бора и эрозией.

### Список литературы

- 1) Горшков О.А., Муравлёв В.А., Шагайда А.А. Холловские и ионные плазменные двигатели для космических аппаратов, М.: «Машиностроение», 2008.
- 2) Дышлюк Е.Н. Исследование ресурсных характеристик плазмы с замкнутым дрейфом электронов бесконтактным методом, диссертационная работа, МФТИ, 2008г.
- 3) Диагностика плазмы, под ред. Р. Хаддлстоуна и С. Леонарда, М.: Мир, 1967.
- 4) Karabadzhak G.F. Improvement of Optical Diagnostic Technique for a Xenon Operating Hall Effect Thruster. 4th International Spacecraft Propulsion Conference, 2-4 June 2004, Sardinia, Italy.
- 5) Karabadzhak G., Gabdulin F., Korsun A., Plastinin Y., Tverdokhlebova E. Optical Emission of a Hall Thruster Plume in Space Condition. 27th International Electric Propulsion Conference, 2001, IEPC-2001-053.



## ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗРЕЖЕННОГО УЛЬТРАХОЛОДНОГО ГАЗА В ОПТИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ Х-ОПЕРАТОРОВ ХАББАРАДА

Кудашкин К.И.

научный руководитель канд. физ. мат. наук Николаев С.В.

Сибирский федеральный университет

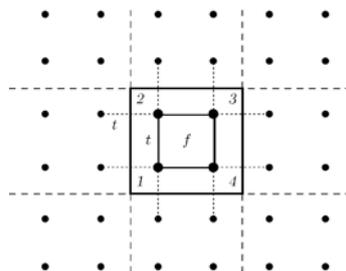
В последнее время появилось множество экспериментальных работ по исследованию газа из ультрахолодных атомов, пойманных в пространственную оптическую решетку. Интерес к данным экспериментам в первую очередь связан с возможностью непосредственно изучать физические явления в квантовых многочастичных системах. Частицы газа (в нашем случае, бозоны) в решетке приобретают кинетическую энергию при туннелировании через потенциальный барьер на соседний узел и испытывают отталкивание, когда на узле решетки больше, чем один атом. Путем изменения интенсивности лазера можно менять количество перескоков в единицу времени и тем самым приводить систему в интересующую фазу. Данное физическое поведение можно описать моделью Бозе-Хаббарда [1, 2].

Гамильтониан 2d-модели Бозе-Хаббарда выглядит следующим образом:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + U \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad (1)$$

где  $t$  – интеграл перескоков между ближайшими соседями,  $U$  – энергия взаимодействия на узле,  $b_i^\dagger$  – оператор рождения бозе-частицы на узле  $i$ ,  $b_i$  – оператор уничтожения бозе-частицы на узле  $i$ ,  $n_i = b_i^\dagger b_i$  – оператор количества частиц на узле  $i$ ,  $\mu$  – химический потенциал,  $\langle \rangle$  – суммирование по ближайшим соседям.

В данной работе мы проводим исследование ультрахолодных атомов в оптической решетке в рамках кластерной теории возмущений, основанной на технике Х-операторов Хаббарда [3], адаптируя её к модели Бозе-Хаббарда (1). Алгоритм данного кластерного подхода следующий. Во-первых, необходимо разбить гамильтониан (1) на две части, выделив внутрискластерное взаимодействие и межкластерное взаимодействие в соответствии с *рис. 1*. Мы используем кластер  $2 \times 2$ .



*Рис. 1. Разбиение решетки на кластеры  $2 \times 2$*

Далее, мы находим собственные состояния кластера, на основе которых осуществляем построение операторов Хаббарда, и переписываем гамильтониан (1) в виде:

$$H = \sum_{f,n} \varepsilon_n X_f^{nn} + \sum_{f \neq g} \sum_{\alpha, \beta} t_{fg}^{\alpha\beta} X_f^\alpha X_g^{-\beta}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_n$  – энергия кластера в состоянии  $n$ ,  $t_{fg}^{\alpha\beta}$  – интеграл межкластерного взаимодействия,  $\alpha$  и  $\beta$  – корневые вектора,  $X_f^\alpha \equiv X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$  – оператор Хаббарда, где  $p$  и  $q$  – конечное и начальное состояния, соответственно.

Определим два типа функций Грина, на операторах Хаббарда и бозонных операторах рождения и уничтожения:

$$D^{\alpha\beta}(f, t; g, t') = \left\langle \left\langle X_f^\alpha(t) X_g^{-\beta}(t') \right\rangle \right\rangle, (3)$$

$$G(if, t; jg, t') = \left\langle \left\langle b_{if}(t) b_{jg}^+(t') \right\rangle \right\rangle, (4)$$

где  $i$  и  $j$  – индексы узлов внутри кластера,  $f$  и  $g$  – кластерные индексы. Здесь использовались обозначения из работы [4].

Записав уравнение движения для (3) и сделав Фурье-преобразование операторов Хаббарда, мы получаем в приближении Хаббард-1 [3] следующее матричное уравнение:

$$D^{-1}(\omega, \tilde{k}) = (D^0(\omega))^{-1} - T(\tilde{k}), (5)$$

где  $D^0(\omega)$  – локальная (кластерная) функция Грина,  $T(\tilde{k})$  – матрица межкластерных перескоков,  $\tilde{k}$  – волновой вектор, принимающий значения в редуцированной зоне Бриллюэна.

Также необходимо учесть связь между двумя функциями Грина (3) и (4)

$$G(\omega, k) = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha\beta} \sum_{ij} \gamma_i(\alpha) \gamma_j^*(\beta) D_{\alpha\beta}(k, \omega) e^{-ik(r_i - r_j)}, (6)$$

где  $N_c$  – число узлов в кластере (в нашем случае равно 4),  $i$  и  $j$  – индексы внутрикластерных узлов,  $k$  – волновой вектор, определенный в исходной зоне Бриллюэна.

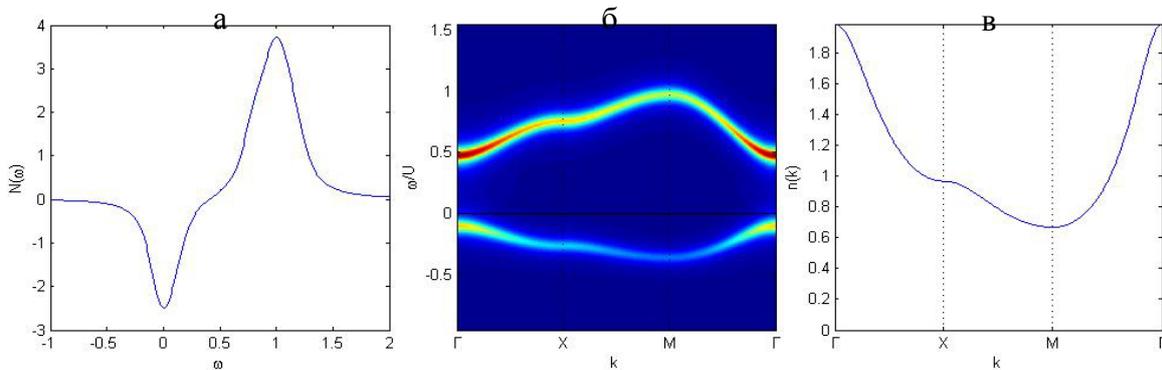


Рис.2. Плотность состояний (а), дисперсия (б), распределение по импульсам (в) при  $t/U = 0.03$

Для корректного построения X-операторов было проведено исследование гильбертова пространства кластера  $2 \times 2$  для модели Бозе-Хаббарда методом точной диагонализации. В рамках кластерной теории возмущений в представлении X-операторов Хаббарда была рассчитана функция Грина (6) и соответствующая спектральная функция.

Спектральная функция позволила исследовать плотность состояний, дисперсию, распределение по импульсам с учетом спектрального веса бозонов при различных значениях параметров системы (рис.2). Исследован квантовый фазовый переход из

состояния Мотта в сверхтекучее состояние от отношения  $t/U$ . Проведено сравнение с другими работами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (госзадание №3085, СФУ 2014 ГФ-2).

#### Список публикаций

[1] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger // Rev.Mod.Phys. -2008- Vol. 80 – С. 885–956 - Библиогр.: с.956.

[2] М. Кнар, Е. Arrigoni, W. Linder // Phys.Rev. B – 2010 – Vol. 81 – С.1-7 – Библиогр.: с.7.

[3] С.В. Николаев, С.Г. Овчинников // ЖЭТФ – 2010 - №138 – С. 717-728 – Библиогр.: с.727.

[4] Д.Н. Зубарев // УФН – 1960 - №71 – С. 71-116 – Библиогр.: с.116.



## СРАВНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В МОДЕЛИ ХАББАРДА И t-J МОДЕЛИ В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Кузьмин В.И.

научный руководитель д-р.физ.-мат. наук проф. Овчинников С. Г.

научный соруководитель канд. физ.-мат. наук Николаев С. В.

*Институт физики имени Л. В. Киренского*

Минимальной моделью, в рамках которой описывается коррелированное движение электронов в твердом теле, является модель Хаббарда. В данной модели рассматривается решетка, в узлах которой находятся s-атомы (полагается, что только один 3d-орбитальный уровень является существенным для электронных свойств в силу снятия вырождения за счет эффекта кристаллического поля) и существует сильное кулоновское отталкивание электронов на одном атоме. Несмотря на свою простоту, гамильтониан модели Хаббарда

$$H = \sum_{i\sigma} \left\{ (\varepsilon - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U}{2} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \right\} - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} \quad (1)$$

позволяет на качественном уровне описывать свойства сильно коррелированных систем и содержит в себе такие явления, как сверхпроводимость, ферромагнетизм, антиферромагнетизм, ферримагнетизм, переход металл-диэлектрик, псевдошелевое поведение. В формуле (1)  $a_{i\sigma}^{\dagger}$  и  $a_{i\sigma}$  – операторы рождения и уничтожения электрона со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ,  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}$  – оператор числа электронов на узле,  $\mu$  – химпотенциал,  $\sigma$  – проекция электронного спина,  $\bar{\sigma} = -\sigma$ ,  $U$  – кулоновское отталкивание двух электронов на узле,  $t_{ij}$  – интеграл перескока с узла  $i$  на узел  $j$  и  $\varepsilon$  задает начало отсчета энергии. Базис одноузельных собственных состояний состоит из четырех конфигураций:

$$|0\rangle \equiv |вакуум\rangle, \quad |\sigma\rangle = a_{i\sigma}^{\dagger} |0\rangle, \quad |2\rangle = a_{i,\uparrow}^{\dagger} a_{i,\downarrow}^{\dagger} |0\rangle. \quad (2)$$

При достаточно высоком значении кулоновского отталкивания сосуществование двух электронов на одном узле является энергетически невыгодным, основное состояние при концентрации электронов на атом  $n=1$  представляет собой антиферромагнитный диэлектрик. В пределе  $U \gg t$  путем канонического преобразования [1] во втором порядке теории возмущений по параметру  $\frac{t}{U}$  можно исключить межзонные перескоки и перейти к эффективной низкоэнергетической модели с гамильтонианом, имеющим в приближении ближайших соседей вид

$$H_{t-J^*} = H_{t-J} + H_3, \quad (3)$$

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{э.с.}) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left( S_i S_j - \frac{n_i n_j}{4} \right), \quad (4)$$

$$H_3 = -\frac{t^2}{U} \sum_{j,\sigma} \sum_{\delta \neq \bar{\delta}} \left( c_{j+\delta,\sigma}^{\dagger} n_{j,\bar{\sigma}} c_{j+\delta',\sigma} - c_{j+\delta,\sigma}^{\dagger} c_{j,\bar{\sigma}}^{\dagger} c_{j,\sigma} c_{j+\delta',\bar{\sigma}} \right), \quad (5)$$

где  $J = 4t^2/U$  – косвенный обменный интеграл. Квазифермиевские операторы рождения  $c_{i\sigma}^{\dagger}$  и уничтожения  $c_{i\sigma}$  здесь действуют в ограниченном гильбертовом пространстве с исключенными двухчастичными состояниями.

Гамильтониан t-J\* модели, представленный формулами (3) – (5), имеет по сравнению с гамильтонианом t-J модели (4) дополнительное слагаемое  $H_3$ ,



учитывающее трехцентровые коррелированные перескоки. В приближении среднего поля влияние трехцентровых взаимодействий выражается в перенормировке спектра. Поэтому, как правило, слагаемым  $H_3$  пренебрегают и работают с гамильтонианом  $t$ - $J$  модели. Тем не менее, есть основания полагать, что трехцентровые взаимодействия играют существенную роль в формировании высокотемпературного сверхпроводящего состояния[2].

После открытия явления высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратах модель Хаббарда и  $t$ - $J$  модель стали привлекать особо пристальное внимание, став основными моделями ВТСП. Однако вопрос о соответствии электронной структуры этих двух моделей в режиме промежуточных электронных корреляций  $U \geq t$  остается далеким от разрешения. В частности, в модели Хаббарда различными кластерными методами помимо полюсов функции Грина, характеризующих контур ферми-поверхности, были получены линии нулей функции Грина[3]. В  $t$ - $J$  модели линии нулей ранее не наблюдались. По-видимому, нули функции Грина не воспроизводятся в низших порядках теории возмущений. Также наблюдаются разногласия между данными, полученными в этих двух моделях при описании высокоэнергетических кинков[4] в купратах.

Для выяснения вопроса о соответствии электронной структуры упомянутых моделей мы провели детальное сопоставление [5] законов дисперсии и плотности состояний в  $t$ - $J$ ,  $t$ - $J^*$  моделях и в модели Хаббарда в рамках кластерной теории возмущений с контролируемым спектральным весом (NC-CPT)[3] с точным учетом ближнего магнитного порядка в кластере  $2 \times 2$ . Полученные спектры (для примера, см. рис. 1) позволяют сделать следующие основные выводы:

1) На масштабе  $\omega \propto J = 4t^2 / U$  все три модели дают схожие результаты для электронной структуры. В частности, в  $t$ - $J$  модели получены линии нулей (см. рис. 2), как и в модели Хаббарда.

2) На масштабе  $\omega \propto t$  учет трехцентровых слагаемых в  $t$ - $J$  модели необходим для воспроизведения электронной структуры модели Хаббарда.



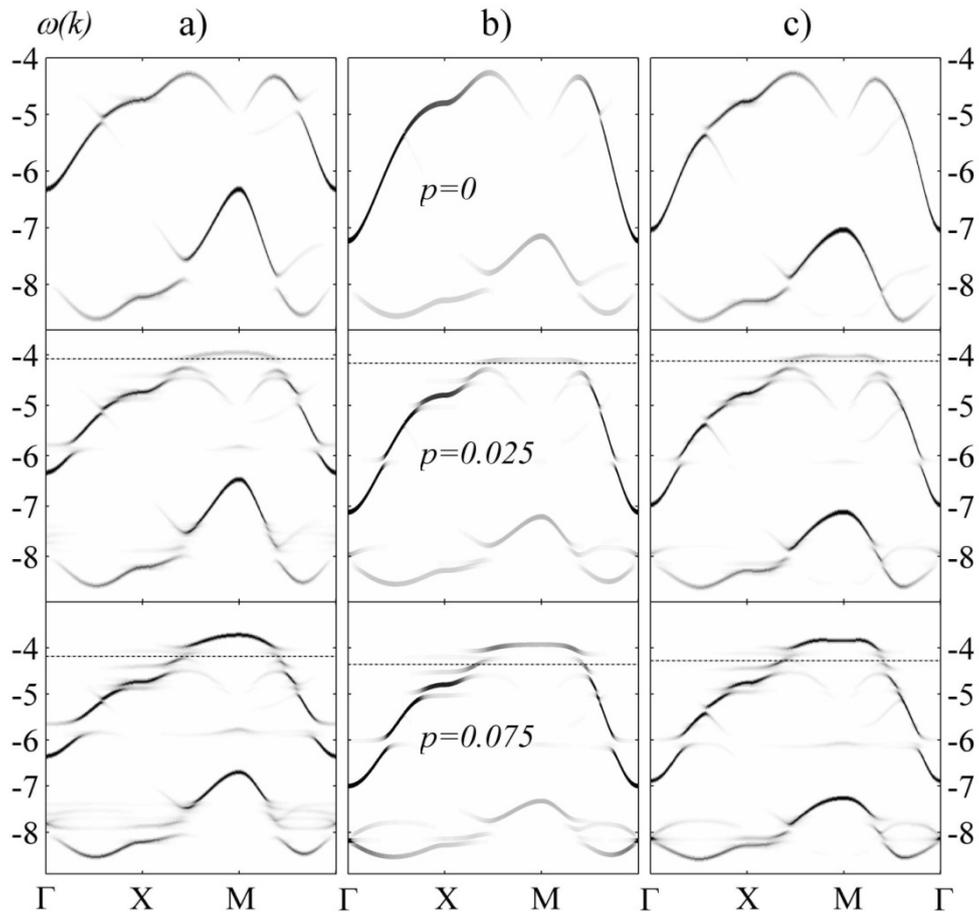


Рис. 1. Распределение спектральной интенсивности вдоль симметричных направлений первой зоны Бриллюэна в  $t$ - $J$  модели (а), нижней хаббардовской зоны модели Хаббарда (б) и  $t$ - $J^*$  модели (с) при  $U = 12$ . Здесь и ниже пунктирной прямой обозначено положение химпотенциала,  $\Gamma=(0, 0)$ ,  $X=(\pi, 0)$ ,  $M=(\pi, \pi)$ ,  $p$  - величина дырочного допирования. Взято из [5].

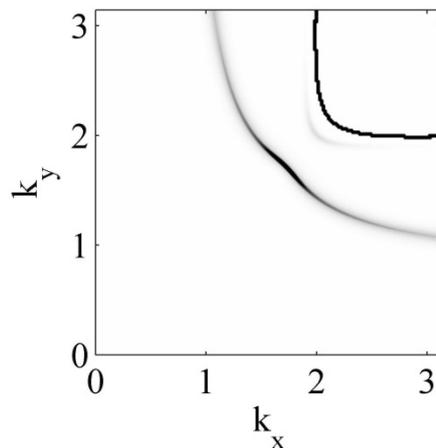


Рис. 2. Распределение спектрального веса в первой четверти первой зоны Бриллюэна на уровне Ферми и линия нулей (сплошная черная кривая) в  $t$ - $t'$ - $t''$ - $J$  модели третьими соседями при  $t' = -0.12t$ ,  $t'' = 0.15t$ ,  $J = 0.295t$ . Допирование дырками  $p = 0.14$ . Взято из [5].

### Список литературы

1. Chao K. A. Kinetic exchange interaction in a narrow S-band /Chao K. A., Spalek J. and Oles A. M.// J. Phys. C: SolidStatePhys. – 1977. – № 10. – С. L271-L276.
2. Вальков В. Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости  $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в t-J\*-модели / Вальков В. В., Валькова Т. А., Дзедзисашвили Д. М., Овчинников С. Г.// Письма в ЖЭТФ. – 2002. – №. 75, – С. 450-453.
3. Николаев С. В., Влияние дырочного допирования на электронную структуру и поверхность Ферми в модели Хаббарда в рамках кластерной теории возмущений с контролируемым спектральным весом / Николаев С. В., Овчинников С.Г.// ЖЭТФ. – 2012. – №. 141, – С. 135-150.
4. Moritz B. Effect of strong correlations on the high energy anomaly in hole- and electron-doped high- $T_c$  superconductors / Moritz B., Schmitt F., Meevasana W., Johnston S., Motoyama E. M., Greven M., Lu D. H., Kim C., Scalettar R. T., Shen Z.-X., Devereaux T. P.// New J. Phys. – 2009. №. – 11. – С. 093020-1-093020-12.
5. Kuz'min V. Comparison of the electronic structure of the Hubbard and t-J models within the cluster perturbation theory / Kuz'min V. I., Nikolaev S. V., Ovchinnikov S. G.// Phys. Rev. B. – 2014. – №. 90. – С. 245104-1-245104-5.



**СОЗДАНИЕ ПРОСТЕЙШЕГО ПЕТРОГРАФИЧЕСКОГО МИКРОСКОПА****Лобастов Б. М.****научный руководитель канд. техн. наук Машукова А. Е.***Сибирский федеральный университет*

Геология является одной из самых обширных наук, изучающей наш мир как на микроуровне, углубляясь в строение минералов, так и в космическом масштабе, изучая не только Землю, но и другие тела Солнечной системы. Роль физики при этом переоценить очень сложно: в геологических исследованиях применяются физические методы, в частности, оптические методы.

Кристаллооптика – это пограничная область оптики и кристаллофизики, охватывающая изучение законов распространения света в кристаллах. При кристаллооптических исследованиях изучаются как морфологические особенности кристаллов, например, их форма, наличие трещин спайности и отдельности, прозрачность, так и специфические свойства, изучаемые в поляризованном свете. При этом есть свойства, наблюдаемые с поляризатором без анализатора, это плеохроизм, псевдоабсорбция, полоска Бекке и дисперсионный эффект Лодочникова. С введением анализатора можно исследовать силу двупреломления минералов, угол погасания и характер погасания, изучать коноскопические фигуры минералов [2, 3]. Для изучения используются специальные препараты – петрографические шлифы. Это очень тонкая (около 0,03 мм) прозрачная пластинка горной породы или технического камня, заклеенная между предметным и покровным стеклом при помощи канадского бальзама [3].

Студенты младших курсов геологических специальностей часто не осознают важность знаний по физике, однако при изучении специальных дисциплин начинают понимать, насколько важна физика для геологов [1]. База знаний по общеобразовательным предметам часто недостаточна для полного понимания всех изучаемых наук. В геологических клубах и кружках нередко отсутствует оборудование для проведения занятий по кристаллооптике. Так, например, поляризационный (петрографический) микроскоп может стоить от первых десятков до сотен тысяч рублей и более. Поэтому было решено изготовить простейший петрографический микроскоп из подручных средств, простой в исполнении, портативный и имеющий перспективы для использования в профориентационной работе и в геологических клубах школьников.

Почему невозможно использование для кристаллооптических исследований школьных биологических микроскопов? Существует несколько серьезных отличий. Биологические микроскопы не имеют поляризатора и анализатора для изучения препаратов в поляризованном свете, отсутствует и линза Бертрана, которую используют для изучения минералов в сходящемся свете. Нет конденсорного устройства и линзы Лазо, являющейся дополнительным конденсатором. Также необходим подвижный предметный столик.

Провести все эти модификации на приборе промышленного изготовления сложно. Для создания первого прототипа портативного поляризационного микроскопа было решено использовать детский микроскоп с пластиковым корпусом (рис. 1). Качество получаемого изображения невелико, однако достаточно для грубой отстройки этого прибора.



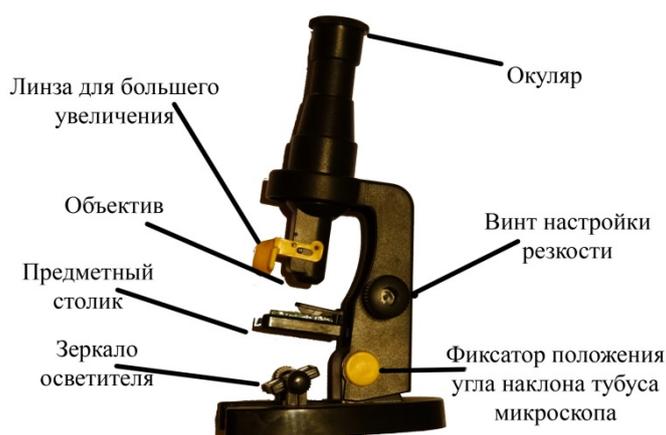


Рис. 1. Устройство «детского» микроскопа

В первую очередь необходимо изменить схему освещения прибора: использованием зеркала сложно добиться постоянного и равномерного освещения. Исправить это можно с применением светодиодов. Чтобы избежать повреждения глаз, вызванного ярким световым пучком, следует использовать импровизированный светофильтр, который можно изготовить из стеклянной пластины с наклеенной на неё клеем ПВА калькой или использовать стёкла разного цвета для подбора наиболее естественного спектра освещения.

Кроме того, сразу поверх светофильтра можно установить поляриод. В этом случае можно пойти двумя путями. Первый – использовать готовый поляриод из набора светофильтров для микроскопов или для фотокамер. При этом стоит учитывать степень поляризации фильтра: чем ближе она к единице, тем лучше будет результат. Во втором случае можно воспользоваться чёрно-белыми ЖК-мониторами от сломанных игрушек, бытовой техники, некоторых сотовых телефонов и т.д.

После проведения этих двух модификаций детская игрушка уже может служить для «взрослых» целей. Пусть столик неподвижный, можно передвигать шлиф прямо на столике для наблюдения плеохроизма и псевдоабсорбции, при расфокусировке изображения можно наблюдать полосу Бекке. Что же это такое с точки зрения физики?

Плеохроизм – изменение окраски веществ при проходящем сквозь них свете в зависимости от направления распространения этого света и его поляризации. Это одно из проявлений оптической анизотропии веществ, при котором меняется поглощаемая длина волны (изменяется окраска), в зависимости от ориентировки исследуемого объекта или плоскости поляризации. В кристаллооптике выделяются три вида плеохроизма, которые можно наблюдать при вращении предметного столика микроскопа:

- сохраняется цвет минерала, но меняется густота окраски,
- меняется цвет, но густота окраски остаётся неизменной
- изменяются и цвет, и его густота.

Если минералы бесцветны, но обладают сильным двупреломлением, то имеет место псевдоабсорбция. В этом случае при вращении предметного столика изменяется окраска зерна с белого на серый, меняется шагреньевая поверхность, «появляются» и «исчезают» трещины спайности в зёрнах. Как правило, у подавляющего большинства минералов двупреломление слишком мало, чтобы можно было наблюдать это явление, однако для некоторых минералов это важное свойство для определения.

Полоска Бекке помогает определить относительные показатели преломления двух веществ, если между ними существует чёткая граница. Наблюдать полоску Бекке можно при слабой расфокусировке микроскопа: в сторону одной из сред от их границы отходит светлая полоска. При падении световых лучей под углом к границе, за счёт полного внутреннего отражения со стороны фазы с большим показателем преломления происходит увеличение интенсивности света. Так как лучи света идут под углом к границе, при изменении положения тубуса микроскопа происходит движение светлой полоски. Отсюда следует, что при увеличении расстояния между объективом и шлифом полоска Бекке смещается в сторону среды с большим показателем преломления [3].

Необходимо было выполнить первую поверку модифицированного прибора. Она заключается в определении ориентировки плоскости световых колебаний, пропускаемых поляризатором. Для этой поверки используют шлиф с чешуйками минерала биотита. Биотит обладает свойством интенсивно поглощать световые колебания, совершающиеся параллельно плоскости его спайности. Вращая шлиф, необходимо найти такое положение, при котором чешуйка биотита будет иметь наиболее тёмную, густую окраску. В этом положении трещинки спайности расположены параллельно плоскости световых колебаний, пропускаемых поляризатором. После этого необходимо установить поляризатор таким образом, чтобы плоскость поляризации была строго горизонтальна или вертикальна для наблюдателя.

Таким образом, получен прибор, способный частично выполнять функции петрографического микроскопа на выездных мероприятиях, где отсутствует необходимое оборудование, и на занятиях со школьниками, где зачастую невозможно использование дорогостоящих приборов. В ближайшей перспективе планируется продолжить модификации микроскопа, а именно: установить выдвижной анализатор, установить вращающийся столик, снабдить микроскоп камерой и усовершенствовать осветитель, добавив к нему диафрагму для регулировки яркости освещения.

Такие приборы помогут пробудить интерес абитуриентов не только к своей будущей специальности, но и к физике, которая является одной из важнейших составляющих многих наук геологического цикла.

### Список литературы

1. Машуков, А. В. Колебания и волны: учеб. пособие / А. В. Машуков, Н. И. Вершинина, А. Е. Машукова - Красноярск: «Гос. ун-т цвет. металлов и золота», 2006. - 120 с.
2. Савельев, И. В. Курс общей физики, т. 2 / И. В. Савельев - М: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. - 496 с.
3. Сазонов, А. М. Петрография магматических пород : учеб. пособие / А. М. Сазонов - Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2014. - 292 с.





УДК 537.611.2

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА В РАМКАХ КВАНТОВОГО МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО В ПРЕДСТАВЛЕНИИ X-ОПЕРАТОРОВ

**ХАББАРДА**

**Мешков К.Н.,**

**научный руководитель канд. физ.-мат. наук, доц. Николаев С.В.**

*Сибирский федеральный университет*

В последнее время в физике конденсированного состояния вещества появился целый ряд задач, для которых невозможно или крайне трудно построить теорию возмущений. В связи с этим большой интерес представляют методы, которые не требуют разложения по малому параметру, так называемые, непертурбативные методы. Одним из таких методов является метод Монте-Карло, введенный Метрополисом для классических систем [1], и который можно применять в квантовой статистической физике, если найдены собственные состояния гамильтониана. Но для многочастичных систем их вычислить практически невозможно, поэтому возникла необходимость развивать новые методы. Сузуки был предложен квантовый метод Монте-Карло, который позволяет рассчитывать необходимые параметры системы, не вычисляя собственные состояния [2]. В настоящее время существует несколько модификаций этого метода [3]. В данной работе мы развиваем квантовый метод Монте-Карло в представлении X-операторов Хаббарда, предложенный в работе [4], и исследуем одномерную модель Гейзенберга с анизотропией типа легкая ось, со спином  $S = 1$ , во внешнем магнитном поле  $H$ , направленном вдоль оси  $z$ .

Гамильтониан модели записывается следующим образом [4]:

$$H = I \sum_f \vec{S}_f \cdot \vec{S}_{f+1} - H \sum_f S_f^z - D \sum_f (S_f^y)^2, (1)$$

где  $\vec{S}_f = (S_f^x, S_f^y, S_f^z)$  – оператор проекции спина;  $f$  – номер узла;  $I$  – константа обменного взаимодействия;  $H$  – величина магнитного поля;  $D$  – константа анизотропии. Данная модель позволяет исследовать термодинамические свойства ферромагнитной и антиферромагнитной цепочек.

Для исследования данной модели был разработан численный алгоритм квантового метода Монте-Карло с использованием техники X-операторов Хаббарда, которые описывают переход из состояния  $|q\rangle$  в состояние  $|p\rangle$  на узле  $f$  и имеют вид:

$$X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|. (2)$$

Удобство операторов Хаббарда заключается в их законе перемножения:

$$X_f^{mn} \cdot X_f^{pq} = \delta_{np} \cdot X_f^{mq}. (3)$$

При этом любой одноузельный оператор можно представить в виде разложения по X-операторам.

Идея квантового метода Монте-Карло состоит в том, что  $d$ -мерная квантовая система отображается на  $d + 1$ -мерную классическую систему применяя обобщенную формулу Троттера для экспоненты от суммы  $k$  операторов [4,5]:

$$e^{\left(\sum_{i=1}^k \hat{O}_i\right)} = \lim_{m \rightarrow \infty} \left[ \prod_{i=1}^k e^{\frac{\hat{O}_i}{m}} \right]^m, (4)$$

где  $m$  – целое число, названное индексом Троттера, который определяет новое добавленное измерение. Дополнительная размерность обуславливает квантовые эффекты. С помощью формулы Троттера (4) и разбиения гамильтониана на две части (по чет-



ным и нечетным узлам, так называемое "шахматно-клеточное разложение" (рис.1)), можно записать статистическую сумму для поставленной задачи в виде[4]:

$$Z^{(m)} = \sum_{\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_{2m}\}} \langle \alpha_1 | \hat{L}_{odd} | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | \hat{L}_{even} | \alpha_3 \rangle \langle \alpha_3 | \hat{L}_{odd} | \alpha_4 \rangle \dots \langle \alpha_{2m} | \hat{L}_{even} | \alpha_1 \rangle, (5)$$

где  $|\alpha\rangle$  - собственные значения оператора  $S^z$ , образующие полный набор,

$$\hat{L}_{odd}^{(even)} = \prod_{odd}^{(even)} \left( e^{\frac{-\beta}{2m} \hat{V}_{f,f+1}} \cdot e^{\frac{-\beta}{m} \hat{H}_{f,f+1}^0} \cdot e^{\frac{-\beta}{2m} \hat{V}_{f,f+1}} \right), (6)$$

$$H_{f,f+1}^0 = I \cdot \vec{S}_f \cdot \vec{S}_{f+1}, V_{f,f+1} = G_f + G_{f+1}, G_f = -\frac{H}{2} S_f^z - \frac{D}{2} (S_f^y)^2. (7)$$

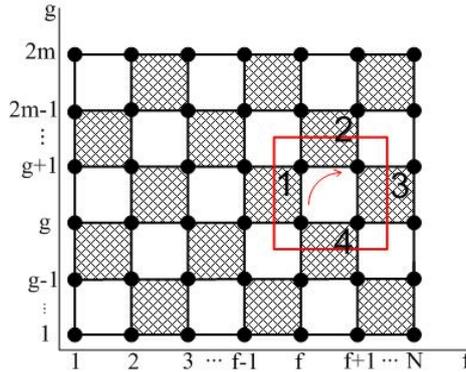


Рис.1. Эффективная квазидвумерная решетка

Использование техники X-операторов Хаббарда(2)-(3) существенно упрощает вычисление матричных элементы в (5), из которых только 41 не равен нулю. В случае  $H = D = 0$  остается 19 ненулевых матричных элементов.

В данной работе исследуются ферромагнитные и антиферромагнитные цепочки с различными значениями параметров обменного взаимодействия и анизотропии, в том числе, и для реальных веществ  $\text{CsNiBr}_3$  и  $\text{CsNiF}_3$ . Были рассчитаны температурные зависимости намагниченности и магнитной восприимчивости при различных значениях внешнего магнитного поля. Проведено сравнение с другими теоретическими и экспериментальными работами. Получено хорошее согласие.

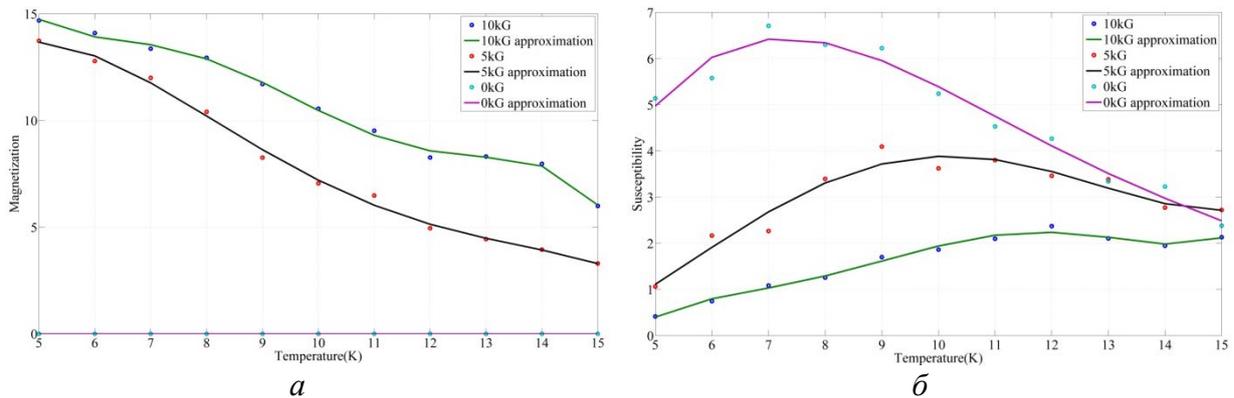


Рис.2. Температурные зависимости намагниченности (а) и магнитной восприимчивости(б) для  $\text{CsNiF}_3$

В частности, на рис.2 представлены температурные зависимости термодинамических величин для  $\text{CsNiF}_3$  [5]. Хорошо заметно, что максимум магнитной восприимчивости имеет пологий вид, что характерно для одномерных цепочек.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №13-02-01395-а) и Минобрнауки России (госзадание №3085, СФУ 2014 ГФ-2).

#### Список литературы

[1] Ермаков, С. М. Методы Монте-Карло и смежные вопросы / С. М. Ермаков. – М.: Наука, 1975. – 473 с.

[2] Suzuki, M. Relationship between d-Dimensional Quantal Spin Systems and (d+1)-Dimensional Ising Systems / M. Suzuki // Prog. Theor. Phys. 1976. V.56, N5. P.1454-1469.

[3] Кашурников, В. А. Численные методы квантовой статистики / В. А. Кашурников, А. В. Красавин. – М.: Физматлит, 2010. – 628 с.

[4] Овчинников, С.Г. Магнитные свойства легкоосной антиферромагнитной цепочки в квантовом методе монте-карло / С. Г. Овчинников, О. Г. Петраковский // ФТТ. 1991. Т.33, № 4. С.1061-1068.

[5] Wysin, G. M. Quantum Monte Carlo and transfer-matrix calculations for one-dimensional easy-plane ferromagnets / G. M. Wysin, A. R. Bishop // Physical Review B. 1986, V. 34, N5. P. 3377 - 3387.





УДК 538.9

## УПРУГИЕ СВОЙСТВА И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТЕЙ УПРУГИХ ВОЛН В СЕГНЕТОЭЛАСТИКАХ $KPb_2Br_5$ и $RbPb_2Br_5$

Рычков И.М., Нестеров А.Е., Турчин В.И., Блинов И.В.,  
научный руководитель канд. физ.-мат. наук Турчин П.П.  
*Сибирский федеральный университет*

### Введение

Монокристаллы сегнетоэластики  $KPb_2Br_5$  и  $RbPb_2Br_5$  относятся к семейству твердых растворов  $APb_2X_5$  ( $A=K, Rb$ ;  $X=Cl, Br$ ) и являются перспективными для лазерной генерации в среднем ИК-диапазоне [1]. В связи с их возможными акустооптическими приложениями представляют интерес упругие свойства рассматриваемых материалов, данные по которым известны для  $KPb_2Cl_5$  [2]. Но до настоящего времени не известны данные по температурным зависимостям упругих постоянных этих материалов.

В настоящей работе импульсным ультразвуковым методом исследуется температурные зависимости скоростей объемных акустических волн (ОАВ) в монокристаллах  $KPb_2Br_5$  и  $RbPb_2Br_5$  и их упругие свойства.

### Образцы и экспериментальный метод исследований

Тетрагональный ( $I4/mcm$ )  $RbPb_2Br_5$  и моноклинный ( $P2_1/c$ )  $KPb_2Br_5$  монокристаллы выращены из стехиометрических составов методом Бриджмена-Стокбаргера. В эксперименте использованы образцы в виде прямоугольных параллелепипедов необходимой кристаллографической ориентации с линейными размерами 5-8 мм.

Для температурных измерений скоростей сдвиговых и продольных объемных акустических волн использована автоматизированная импульсная ультразвуковая установка на основе осциллографа DPO 72004, который обеспечивает регистрацию сигнала в режиме реального времени с максимальной частотой дискретизации 50 ГГц [3]. Блок-схема автоматизированного ультразвукового импульсного метода приведена на рис.1. Короткий (30 нс) импульс с генератора 1 подается на пьезопреобразователь 3 и после многократного отражения в образце 4 серия отраженных импульсов регистрируется осциллографом 6. В схеме применен широкополосный ограничитель-усилитель сигнала 2, изготовленный по планарной технологии на основе малошумящего высокоскоростного операционного усилителя с низким коэффициентом искажений AD8099. Тем самым ограничивается амплитуда зондирующего импульса до входного уровня напряжения осциллографа 6 и повышается чувствительность метода при регистрации сигналов малой амплитуды.

Рубидиевый стандарт частоты 7 обеспечивает температурную стабилизацию тактовой частоты осциллографа 6. Задающий генератор 5 запускает генератор 1, синхронизирует развертку осциллографа 6 и позволяет управлять временем запуска зондирующих импульсов. Экспериментальное значение скорости ОАВ в реализованной методике находится по известной длине образца  $l$  и измеренному времени распространения импульса в образце  $\tau$ :  $v = 2l/\tau$ . Разрешение по времени при частоте дискретизации 12,5 ГГц составляло 0,1 нс.



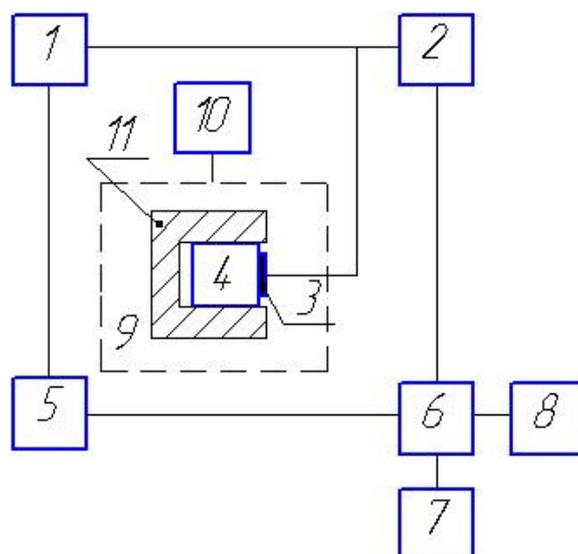


Рис.1. Блок-схема автоматизированного импульсного метода. 1 – генератор импульсов Г5-66, 2 – ограничитель-усилитель сигнала, 3 – пьезопреобразователь ( $f_{рез.}=30\text{МГц}$ ), 4 – образец, 5 – задающий генератор AFG 3252, 6 – осциллограф DPO 72004, 7 – рубидиевый стандарт частоты FS725, 8 – персональный компьютер, 9 – термостат Optistat DNV, 10 – ПИД-регулятор ITC503, 11 – нагревательный элемент

Для определения температурной зависимости скоростей ОАВ в экспериментальной схеме применен вакуумный термостат Optistat DNV (диапазон температур 77 – 500 К, точность стабилизации 0,1 К) с применением многозонного контроля температуры исследуемого образца.

### Результаты исследований

Указанным экспериментальным методом в кристаллофизических направлениях, представленных в таблице 1, были измерены значения скоростей ОАВ различных поляризаций и их температурные зависимости (рис. 2). При определении скоростей ОАВ были учтены температурные коэффициенты линейных расширений [4].

В каждом случае рассчитаны коэффициенты скоростей упругих волн (TCV) при комнатной температуре.

$$TCV = \frac{1}{V(20^{\circ})} \frac{(V(40^{\circ}) - V(0^{\circ}))}{40^{\circ}} \quad (1)$$

Модули упругости монокристаллов находились по измеренным значениям скоростей ОАВ путем решения уравнений Кристоффеля [2]

$$(\Gamma_{il} - \lambda \delta_{il}) U_l = 0, \quad (2)$$

где  $\Gamma_{il} = C_{ijkl}^E n_j n_k$  – тензор Кристоффеля,  $C_{ijkl}^E$  – тензор модулей упругости,  $n_i$  – единичный вектор волновой нормали,  $\lambda = \rho v^2$  – собственные значения,  $U_l$  – собственные векторы  $\Gamma_{il}$ .

Результаты вычислений модулей упругости обобщены в таблице 2. Погрешность определения  $C_{\lambda\mu}$  не превышает  $0,05 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ .

Обнаружено, что монокристаллы  $\text{KРb}_2\text{Br}_5$  и  $\text{RbPb}_2\text{Br}_5$  обладают высокими значениями температурных коэффициентов скоростей упругих волн (на порядок

больше в сравнении с  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ ) и линейными зависимостями скоростей объемных акустических волн во всем рассматриваемом температурном интервале от 290 до 420<sup>0</sup>К.

Таблица 1. Скорости и температурные коэффициенты скоростей ОАВ в монокристаллах  $\text{KРb}_2\text{Br}_5$  и  $\text{RbPb}_2\text{Br}_5$

	№	$\vec{n}$ , [hkl]	Тип волны	$\vec{U}$ Поляризация	$v \pm \Delta v$ , м/с $\Delta v = 2$ м/с, $T=20^\circ\text{C}$	TCV, $10^{-6}$ град <sup>-1</sup>
$\text{KРb}_2\text{Br}_5$	1	[001]	L	[001]	2429	-244
	2		SS	[100]	1331	-337
	3		SF	[010]	1338	-367
	4	[110]	L	[110]	2571	-285
	5		SS	[1 $\bar{1}$ 0]	1204	-302
	6		SF	[001]	1339	-343
	7	[010]	L	[010]	2239	-334
	8		SS	[001]	1336	-369
	9		SF	[100]	1518	-356
	10	[304]	L	[101]	2549	-263
	11		SS	[ $\bar{4}$ 03]	1248	-191
	12		SF	[010]	1432	-349
	13	[100]	L	[100]	2559	-228
	14		SF	[010]	1523	-341
	15		SS	[001]	1334	-313
	16	[023]	L	[023]	2397	-284
	17		SS	[032]	1231	-367
	18		SF	[100]	1432	-342
$\text{RbPb}_2\text{Br}_5$	19	[010]	L	[010]	2404	-316
	20		SF	[100]	1631	-328
	21	[001]	L	[001]	1834	-340
	22		S		1239	-450
	23	[110]	L	[110]	2659	-325
	24	[021]	L	[021]	2369	-333
	25		S	[010]	1224	-411

Таблица 2. Модули упругости  $C_{\mu}$ ,  $10^{10}$  Н/м<sup>2</sup> в монокристаллах  $\text{KРb}_2\text{Br}_5$  и  $\text{RbPb}_2\text{Br}_5$  ( $T=20^\circ\text{C}$ )

	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{15}$	$C_{22}$	$C_{23}$	$C_{25}$	$C_{33}$	$C_{35}$	$C_{44}$	$C_{46}$	$C_{55}$	$C_{66}$
$\text{RbPb}_2\text{Br}_5$ $\rho=5830$ кг/м <sup>3</sup>	3,3 5	1,7 7	2,2 0					1,9 5		0,8 8			1,5 4
$\text{KРb}_2\text{Br}_5$ $\rho=5619$ кг/м <sup>3</sup>	3,6 8	1,4 5	1,7 5	0,0 5	2,8 2	0,9 7	0,3 2	3,3 1	0,1 1	1,0 1	0,1 0	1,0 0	1,3 0
$\text{KРb}_2\text{Cl}_5$ [ 2]	4,3 4	1,9 3	1,7 7	- 0,5 5	3,5 3	1,5 2	0,0 5	3,6 2	0,0 6	1,1 1	0,0 3	1,1 0	1,4 3



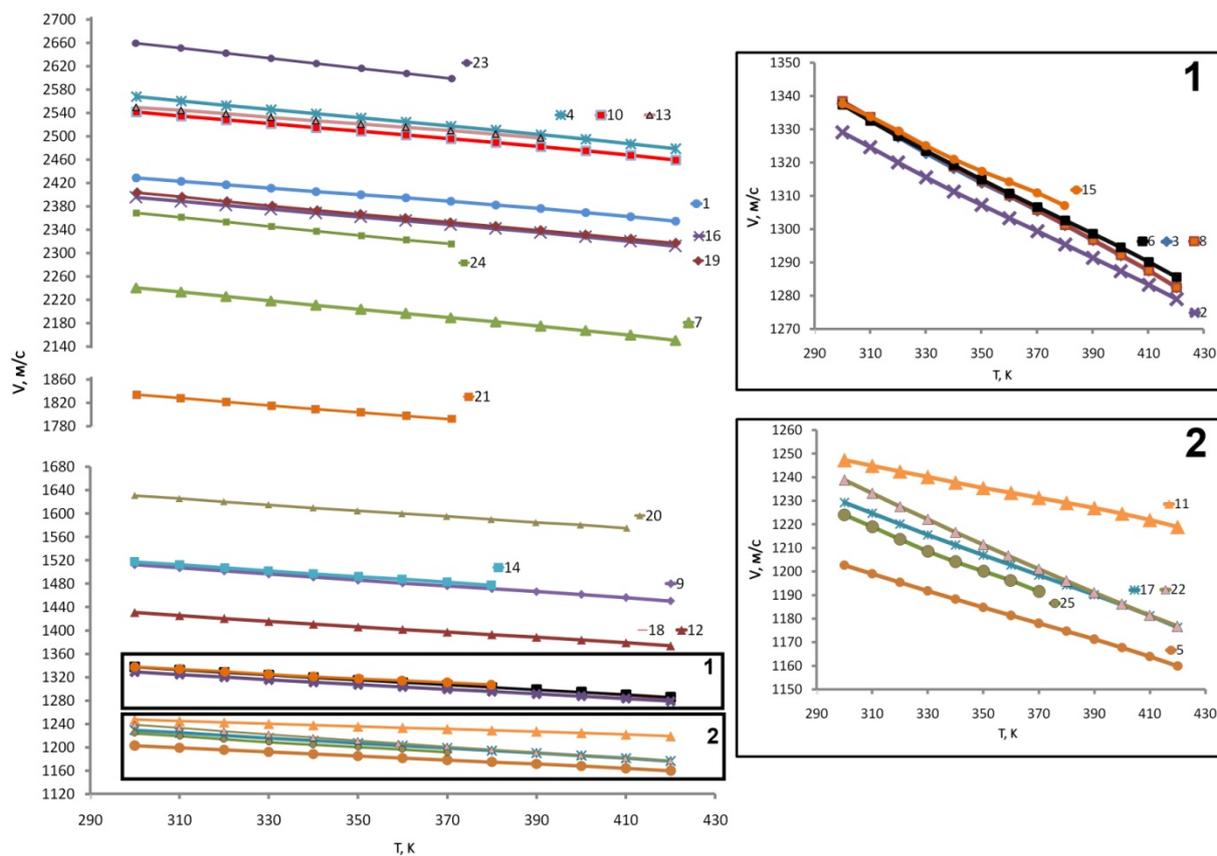


Рис. 2. Температурная зависимость скоростей ОАВ в монокристаллах  $KPb_2Br_5$  и  $RbPb_2Br_5$ , нумерация согласно таблицы 1

### Список литературы

1. Исаенко, Л.И. Исследование влияния постепенного замещения  $K \leftrightarrow Rb$  на структуру и фазовый переход в твердых растворах  $K_xRb_{1-x}Pb_2Br_5$  / Л.И. Исаенко, С.В. Мельникова, А.А. Меркулов, В.М. Пашков, А.Ю. Тарасова // ФТТ, - 2009, - Т.51, - В.3. - с.554-557.
2. Александров, К.С. Колебательный спектр и упругие свойства кристалла  $KPb_2Cl_5$  / К.С. Александров, А.Н. Втюрин, А.П. Елисеев, Н.Г. Замкова, Л.И. Исаенко, С.Н. Крылова, В.М. Пашков, П.П. Турчин, А.П. Шибанин // ФТТ, - 2005, - Т.47, - В.3. - с.512-518.
3. Турчин, П.П. Импульсные автоматизированные измерения скоростей упругих волн в кристаллах / П.П. Турчин, А.А. Парфенов, Н.А. Токарев, А.Е. Нестеров, А.Ю. Тарасова, К.С. Александров // Ползуновский вестник – №3/1, - 2011. - с. 143-147.
4. Tarasova, A.Y. Coefficients of thermal expansion of  $KPb_2Cl_5$  and  $RbPb_2Br_5$  crystals / A.Y. Tarasova, Y.V. Seryotkin, V.M. Pashkov, L.I. Isaenko // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, - 2011.- 104.- 2.- 795-796.



## ИЗУЧЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ХОЛОДНОГО ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

Сагадиев И.А.

научный руководитель канд. физ.-мат. наук Дмитриев В.Л.

*Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета*

Хотя лед и относится к числу давно известных материалов, однако его свойства изучены еще далеко не достаточно. Именно поэтому многие современные исследования направлены на решение различных проблем, связанных с образованием льда.

Так, проблемы защиты искусственных и природных покрытий от различных видов намерзания, создающего угрозу жизнедеятельности людей и безопасной эксплуатации технических сооружений, рассмотрены в работе [2].

В работе [3] развивается серия публикаций о конечноэлементном моделировании контактного взаимодействия ледяного покрова с некоторыми конструкциями и средами. Проведен сравнительный анализ результатов моделирования контакта ледяных образований с учетом гидродинамики на базе выбранного САЕ-алгоритма контактного взаимодействия льда с водой.

Некоторые другие задачи с подвижными границами также рассмотрены в работах [1, 4], посвященных изучению разложения газовых гидратов в природных пластах.

В рассматриваемой работе поставлена простая задача (с подвижной границей) одномерного моделирования процесса образования льда при контакте холодного тела и жидкости на основе уравнений теплопроводности.

Рассмотрим полубесконечное холодное твердое тело, контактирующее с жидкостью (например, водой). В плоскости контакта тела с жидкостью (координата  $x = 0$ ) начинается процесс образования льда. При этом мы имеем дело с подвижной границей, на которой происходит прирост нового слоя льда (координата  $x = x_b$ ). В области  $-\infty < x < 0$  находится твердое тело, в области  $0 \leq x < x_b$  расположен слой образующегося льда, а в области  $x_b \leq x < \infty$  находится жидкость.

Необходимо выяснить, как изменяется координата  $x_b$ , определяющая толщину слоя льда, со временем. Для этого нужно решить температурную задачу для контактирующих сред.

Для описания распределения температур в рассматриваемых зонах воспользуемся уравнениями теплопроводности:

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \lambda_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2}, \quad (x < 0)$$

$$\rho_i c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \lambda_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2}, \quad (0 \leq x < x_b)$$

$$\rho_l c_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \lambda_l \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2}, \quad (x \geq x_b)$$

где  $\rho_j$  – плотность,  $c_j$  – удельная теплоемкость,  $\lambda_j$  – теплопроводность; нижний индекс  $j = s, i, l$  относится к твердому телу, льду и жидкости соответственно.

На границах раздела сред «твердое тело – лед» и «лед – жидкость» имеют место условия равенства температур и тепловых потоков, математическая запись которых имеет вид:



$$T_s = T_i = T_{si}, \quad \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}, \quad (x = 0)$$

$$T_i = T_l = \tilde{T}, \quad \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho_l L \dot{x}_b, \quad (x = x_b)$$

где  $L$  – удельная теплота плавления льда,  $\tilde{T}$  – температура кристаллизации. Температуру  $T_{si}$  на границе раздела «твердое тело – лед» будем считать постоянной ( $T_{si} = \text{const}$ ).

В начальный момент времени  $t = 0$  температуры твердого тела и жидкости однородны и равны соответственно  $T_{s0}$  и  $T_{l0}$ .

Введя автомодельную переменную, для решений записанной выше системы уравнений будем иметь:

$$T_s = T_{s0} + (T_{si} - T_{s0}) \int_{-\infty}^{\xi} \exp\left(-\frac{\aleph_i \xi^2}{\aleph_s 4}\right) d\xi / \int_{-\infty}^0 \exp\left(-\frac{\aleph_i \xi^2}{\aleph_s 4}\right) d\xi, \quad (-\infty < \xi < 0)$$

$$T_i = T_{si} + (\tilde{T} - T_{si}) \int_0^{\xi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) d\xi / \int_0^{\xi_b} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) d\xi, \quad (0 \leq \xi < \xi_b)$$

$$T_l = T_{l0} + (\tilde{T} - T_{l0}) \int_{\xi}^{\infty} \exp\left(-\frac{\aleph_i \xi^2}{\aleph_l 4}\right) d\xi / \int_{\xi_b}^{\infty} \exp\left(-\frac{\aleph_i \xi^2}{\aleph_l 4}\right) d\xi. \quad (\xi_b < \xi < \infty)$$

На основе приведенной простейшей модели образования льда при контакте жидкости с холодным телом, можно строить другие более сложные модели. Например, можно учитывать наличие источников тепла, рассматривать ограниченные области, рассмотреть указанную задачу в условиях радиальной симметрии, и т.д.

Также в работе получено, что образование ледяного слоя возможно только в случаях, если температуры твердого тела и жидкости удовлетворяют следующему условию:

$$T_l \leq \tilde{T} + \frac{\lambda_s (T_{si} - T_{s0})}{\lambda_l} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\aleph_i \xi^2}{\aleph_l 4}\right) d\xi / \int_{-\infty}^0 \exp\left(-\frac{\aleph_i \xi^2}{\aleph_s 4}\right) d\xi.$$

### Список литературы

1. Дмитриев, В.Л. Инжекция горячего газа как энергоэффективный способ добычи газа из газогидратного месторождения / В.Л. Дмитриев, А.А. Потапов // Сборник научных трудов II Всероссийской научно-технической конференции с международным участием «Высокие технологии в современной науке и технике». Т.2. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2013. – С. 365-368.
2. Лапшин, В.Б. Экспериментальные исследования методов защиты от обледенения / В.Б. Лапшин, А.А. Палей, Н.В. Жохова и др. // Исследовано в России: электронный научный журнал. – 2007. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2007/107.pdf>
3. Лобанов, В.А. Гидродинамика льда в задачах с конечноэлементной постановкой // Дифференциальные уравнения и процессы управления: электронный журнал. – 2010. – №1. – С. 10-17.
4. Шагапов, В.Ш. Тепловой удар под воздействием энергии излучения на пористую среду, частично заполненную газогидратом / В.Ш. Шагапов, Л.А. Насырова, А.А. Потапов, В.Л. Дмитриев // Инженерно-физический журнал. – 2003. – Т.76. – №5. – С. 47-53.



## ОПИСАНИЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СЛОИСТЫХ ПЕРОВСКИТАХ В РАМКАХ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ЛАНДАУ

Сафонов И. Н.,

научные руководители: д-р. физ.-мат. наук, проф. Мисюль С.В.,  
канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. Молокеев М.С.

*Институт инженерной физики и радиоэлектроники  
Сибирский федеральный университет*

### Введение

Слоистые перовскиты и родственные кристаллы или перовскитоподобные соединения привлекают к себе повышенный интерес [1]. Во-первых, благодаря большому многообразию физических свойств и возможности их использования в различных устройствах. Во-вторых, структуры слоистых перовскитовых соединений хотя и просты, но обладают гибкостью, позволяющей в широких пределах менять набор ионов, образующих кристаллическую решётку, что даёт возможность реализовывать широкий спектр разнообразных свойств. В-третьих, такие соединения являются модельными объектами для теоретических и экспериментальных исследований. И, наконец, перовскитоподобные соединения испытывают различные фазовые переходы (ФП): структурные, сегнетоэлектрические, сегнетоэластические, магнитные, ФП в сверхпроводящее состояние. Перечисленные обстоятельства привели к синтезу большого числа новых слоистых перовскитов, физические характеристики которых требовали детального изучения.

При экспериментальном исследовании ФП существенную роль играют симметричные методы, которые опираются на феноменологическую теорию ФП второго рода, разработанную Ландау более 70 лет тому назад. Схема симметричного рассмотрения последовательностей ФП в перовскитоподобных соединениях развита в работах отечественных и зарубежных исследователей (см. библиографию в [1, 2]). Отличительная черта симметричных методов в том, что они выявляют общие закономерности изменений физических свойств и симметрии при ФП.

Анализируя возможные искажения исходной структуры (фаза  $G_0$ ), рассматривают, как правило, один параметр порядка (ПП) и одно неприводимое представление (НП), которые описывают изменение симметрии при ФП. Такие ПП и НП называются критическими. Однако искажение структуры исходной фазы  $G_0$  в ряде случаев невозможно описать только критическими ПП. В искажённой (диссимметричной) фазе  $G_1$  могут осуществиться смещения или упорядочения атомов, совместимые с симметрией этой фазы, и которые задаются не критическими ПП и НП. Вся совокупность ПП, критических и не критических, возникающих в ходе ФП, образует полный конденсат ПП.

В настоящей работе проводится феноменологическое описание ФП в слоистых перовскитах, которые в исходной высокотемпературной фазе принадлежат к группе  $G_0 = P4/mmm$ . Наиболее изученные из слоистых перовскитов имеют формулу  $ABX_4$ , например  $CsScF_4$  [3]. Наблюдающиеся последовательности ФП и искажения структуры при понижении температуры в таких кристаллах описываются при помощи двух критических НП  $M_2^+$  и  $X_2^-$  [3].

### 1. Описание термодинамической модели

Критическое одномерное НП  $M_2^+$  индуцирует изменение симметрии при ФП первого рода [3], другой ФП второго рода связан с ПП, преобразующегося по



двумерному НП  $X_2^-$ . Термодинамический потенциал (ТП), соответствующий этим представлениям и описывающий последовательность ФП, можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}\Phi &= \Phi_M + \Phi_X + \Phi_{MX}, \\ \Phi_M &= a_1 \eta^2 + a_2 \eta^4 + a_3 \eta^6, \\ \Phi_X &= \alpha_1 I_1 + \alpha_2 I_1^2 + \beta_1 I_2 + \beta_2 I_2^2 + \delta I_1 I_2, \\ \Phi_{MX} &= b \eta^2 I_1, \\ I_1 &= \chi_1^2 + \chi_2^2, \quad I_2 = (\chi_1^2 + \chi_2^2)^2,\end{aligned}$$

где  $\Phi_M$  – часть потенциала, связанная с  $M_2^+$ ,  $\Phi_X$  – часть потенциала, связанная с  $X_2^-$ , а  $\Phi_{MX}$  – потенциал взаимодействия,  $\eta, \chi_1, \chi_2$  – параметры порядка.

Заметим, что часть ТП  $\Phi_M$ , связанная с одномерным НП и НП, записана до 6-й степени по  $\eta$ . Это следует из необходимости описания ФП перехода первого рода [4]. Для этого так же примем  $a_2 < 0$ . Другая часть ТП  $\Phi_X$  записана до 8-й степени по двухкомпонентному НП  $\chi_1, \chi_2$ . Так как это наименьшая степень, при которой возможно описать возникновение всех появляющихся в экспериментах низкосимметричных фаз [2 - 4].

Введем еще два ограничения на коэффициенты ТП, которые следуют из условия существования глобально минимума:  $a_3 > 0$  и  $\alpha_2 > 0$ .

Анализ приведенного ТП и описание диаграмм фазовых состояний проведен стандартным образом, подробно описанным в [2, 4].

## 2. Возможные типы диаграмм фазовых состояний

На рисунках 2-4 представлены фазовые диаграммы в различных плоскостях по коэффициентам разложения ТП. Во всех приведенных случаях  $\beta_2 < 0$ . Коэффициент  $b$  определяет очередность переходов: если  $b > 0$ , то сначала возникает НП  $\eta$ , иначе первой будет фаза с ненулевыми компонентами  $\chi$ . Полученные фазовые диаграммы отличаются от диаграмм для невзаимодействующих  $\Phi_M$  и  $\Phi_X$  сдвигом вдоль  $a_1$  и  $\alpha_1$  на величину, пропорциональную коэффициенту  $b$ .

На рисунках сплошными линиями изображены линии ФП первого рода, пунктирными – линии ФП второго рода, штрихпунктирными – границы устойчивости фаз при переходе первого рода.

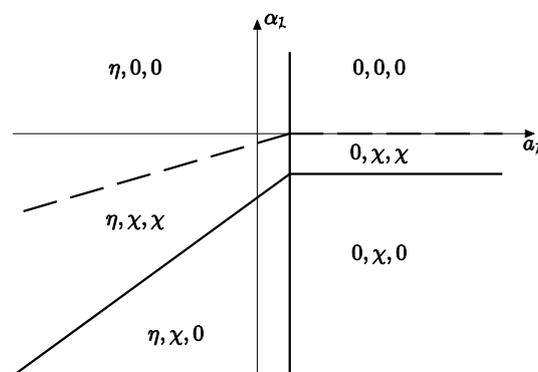


Рис. 1. Фазовая диаграмма в осях  $\alpha_1$  и  $a_1$  коэффициентов ТП

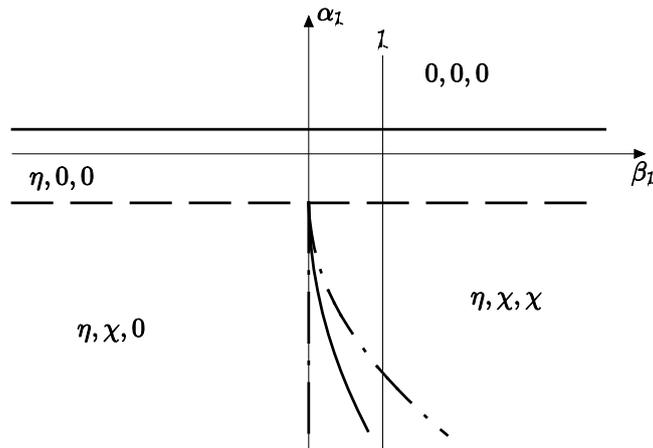


Рис.2. Фазовая диаграмма в осях  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  коэффициентов ТП

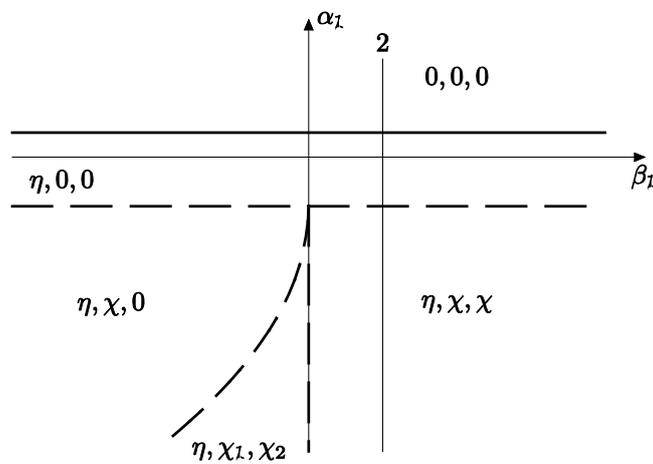


Рис.3. Фазовая диаграмма в осях  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  коэффициентов ТП.  $\beta_2 > 0$ .

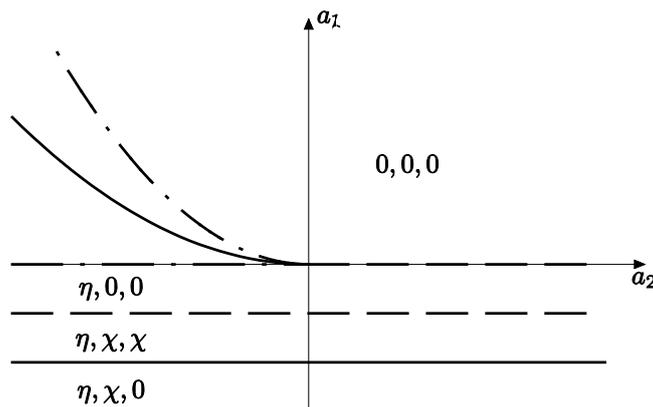


Рис.4. Фазовая диаграмма в осях  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  коэффициентов ТП

На рис. 2 и 3 показано, что в случае  $\beta_2 < 0$  при дальнейшем понижении температуры возможен еще один фазовый переход первого рода (термодинамический путь отмечен на рис.2 линией 1. Если же  $\beta_2 > 0$  и  $\beta_1$  изменяется пропорционально температуре, то возможна другая низкотемпературная фаза с ПП вида  $(\eta, \chi_1, \chi_2)$ . Если

$\beta_1$  от температуры не зависит, то реализуется путь 2 (рис.3), и при понижении температуры фаза  $(\eta, \chi, \chi)$  остается стабильной. Такое поведение и последовательность фазовых состояний может реализоваться в кристалле CsScF<sub>4</sub> [3].

#### **Заключение**

В работе найдены соотношения между коэффициентами разложения термодинамического потенциала по параметрам порядка одномерного  $M_2^+$  и двумерного  $X_2^-$  неприводимых представлений, определяющие области существования и устойчивости фаз, которые могут возникнуть в слоистых перовскитах ABX<sub>4</sub>. Зная картину фазовых состояний, можно представить, как она изменится вследствие разнородных внешних воздействий, что необходимо к осознанному выбору кристаллов и воздействий на них при практическом использовании.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ Сибирскому федеральному университету на выполнение НИР в 2014 году (Задание № 3.2534.2014/К).

#### **Список литературы**

1. Александров К.С., Безносиков Б.В. Перовскиты. Настоящее и будущее. (Многообразие прафаз, фазовые превращения, возможности синтеза новых соединений) // Новосибирск: Изд-во СО РАН.-2004.-231с.

2. Мисюль С.В. Симметричные и рентгендифракционные исследования фазовых переходов в перовскитоподобных соединениях // Докторская диссертация. Красноярск. – 2009. -374с.

3. Flerov I.N., Aleksandrov K.S., Melnikova S.V., Kruglik A.I., Misjul S.V., Beznosikov B.V. Phase transitions in layered ferroelastics. New representatives: CsScF<sub>4</sub> and Rb<sub>3</sub>Cd<sub>2</sub>Cl<sub>7</sub> // Ferroelectrics. -1989. –V.96, №4. – P.175-179.

4. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов.- М: Наука, 1984.- 245с.



## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ КРИСТАЛЛА $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$ ПОРОШКОВЫМ МЕТОДОМ Соловьева Е.С.

**научные руководители: д-р.физ.-мат. наук, проф. Мисюль С.В., канд.физ.-мат.наук, ст.науч. сотр. Молокеев М.С.**

*Институт инженерной физики и радиоэлектроники Сибирского Федерального  
Университета*

### Введение

Соединения с общей формулой  $A^I_3M^{IV}F_7$  ( $A^I = \text{Rb}, \text{Cs}, \text{K}, \text{Na}, \text{Li}, \text{Tl}, \text{NH}_4$ ;  $M^{IV} = \text{Si}, \text{Ti}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Ni}, \text{Th}, \text{Zr}, \text{Ge}, \text{Ce}, \text{Tb}, \text{Hf}, \text{U}, \text{Pb}, \text{Sn}$ ) можно условно разделить на две группы [1-3]. К первой относятся соединения с координацией иона  $M^{IV}$  равной 7, 8 или 9. Ко второй группе относятся соединения, в которых содержатся октаэдры  $M^{IV}F_6$ , а седьмой ион F формирует группу  $A^IF$ , в итоге формула соединения имеет вид  $A_2MF_6 \cdot AF$ . Большинство соединений второй группы кристаллизуются в пространственной симметрии  $P4/mbm$ , за исключением  $(\text{NH}_4)_2\text{PbF}_6 \cdot (\text{NH}_4)F$  и  $(\text{NH}_4)_2\text{SnF}_6 \cdot (\text{NH}_4)F$ , пространственная группа которых при комнатной температуре по данным из [3] есть  $Pm-3m$ . Сравнительно недавно в кристалле  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  сотрудниками Института физики СО РАН И.Н.Флеровым, С.В.Мельниковой и Е.И.Погорельцевым обнаружен фазовый переход в районе 100 °С. При этом симметрии выше и ниже температуры перехода оказались кубическими. Если симметрия и структура  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  выше температуры перехода ясна [2, 3], то о симметрии и структуре кристалла ниже температуры перехода сведения практически отсутствуют.

Целью настоящей работы являлось определение структуры низкотемпературной кубической фазы  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  по порошковому рентгенодифракционному эксперименту.

### 1. Экспериментальные результаты

Монокристаллы  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  выращены и любезно предоставлены для исследований сотрудником Института химии Дальневосточного РАН (г.Владивосток) Н.М.Лапташ

Образец для рентгеновских исследований в виде порошка приготавливался из монокристалла. Рентгенограммы кристалла  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  при температуре +90 °С получены на порошковом дифрактометре D8-ADVANCE фирмы Bruker с использованием  $\text{Cu-K}\alpha$  излучения ( $\lambda=1.54056 \text{ \AA}$ ), линейного детектора VANTEC и температурной камеры ТТК-450 Anton Paar. Шаг сканирования по углу  $2\theta$  равен  $0.016^\circ$ , экспозиция 0.6 секунды в каждой точке.

Фазовый анализ соединения  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$ , выполненный при помощи программы SearchMatch, показал, что основные рефлексы на рентгенограмме при +90 °С (см. рис.1) соответствуют примитивной кубической ячейке с параметрами  $a=6,046 \text{ \AA}$  и пространственной группой  $Pm-3m$ , что хорошо согласуется с данными при комнатной температуре, полученными в работе [2]. Однако, кроме указанных основных рефлексов на рентгенограмме присутствовали слабые рефлексы (рис.1), которые никак не описывались вышеупомянутой группой  $Pm-3m$ . При повышении температуры интенсивность этих рефлексов падала и, в районе +100 °С рефлексы пропадали. Такое поведение рефлексов свидетельствует об изменении в процессе фазового перехода трансляционной симметрии, т.е. кратном изменении параметров ячейки.

### Интенсивность



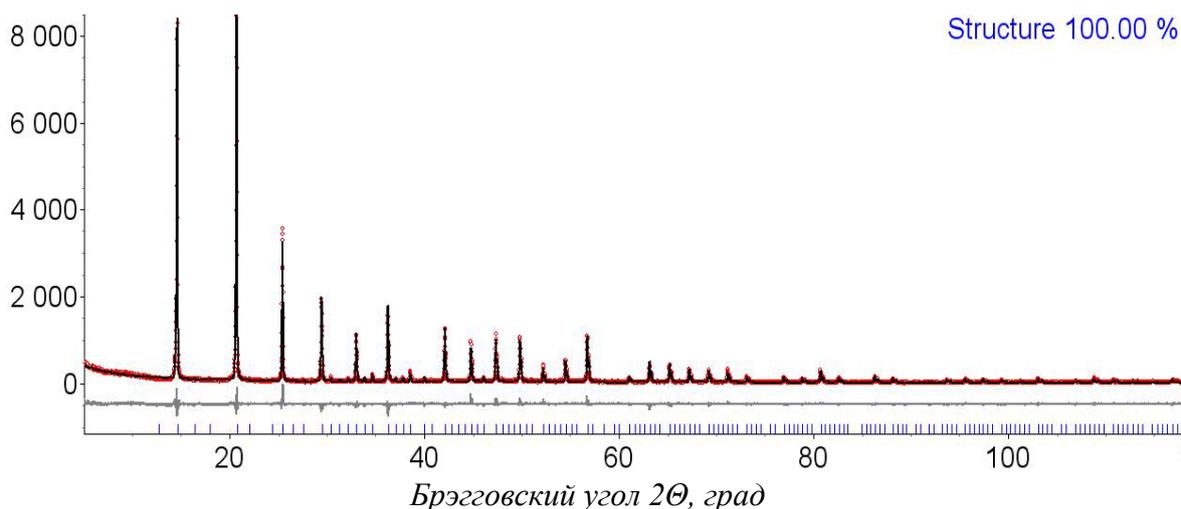


Рис.1. Рентгенограмма соединения  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  при 90 °С. Экспериментальная (красная линия), теоретическая (черная линия) и разностная (серая линия) рентгенограммы

Рентгенограмма соединения  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  проиндексирована при помощи программ ИТО и TOPAS 4.2 [4] с удвоенными значениями параметров кристаллической ячейки (табл.1). Условия погасания рефлексов соответствовали шести кубическим пространственным группам: P23, Pm3, Pa-3, P432, P-43m и Pm-3m, выбор между которыми был сделан при уточнении кристаллической структуры.

Таблица 1. Обратные величины удвоенных значений межплоскостных расстояний  $1/(2d_i)$  для сверхструктурных рефлексов соединения  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  при +90 °С, в соответствии с межплоскостными расстояниями  $d_{hkl}$  основных рефлексов

№	$1/(2d_i), \text{Å}^{-1}$	(hkl)
1	0,3397	(041)
2	0,3594	(331)
3	0,3777	(421)
4	0,3864	(332)
5	0,4202	(051)

## 2. Поиск и уточнение структуры $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$

Используя удвоенные параметры ячейки  $a=b=c=12,0928 \text{ Å}$  кубической фазы, проведена подгонка профиля рентгенограммы с учетом указанных вариантов групп. Уточнение профиля для группы Pa-3 дало наилучший результат с использованием наименьших количеств рефлексов (Рис.1).

Поиск модели структуры проведен в прямом пространстве путём перебора вариантов методом Монте-Карло [4]. В результате определены координаты двух независимых ионов Sn, трех ионов F и одного атома N, соответствующего аммонийному иону  $\text{NH}_4$ . Атомы водорода не были локализованы и не включены в модель.

Для уточнения координат и тепловых параметров атомов методом Ритвельда использовалась программа TOPAS 4.2. Координаты атомов после уточнения структуры представлены в табл.2. Рассчитанные и экспериментальные профили рентгенограммы показали хорошее совпадение (Рис.1), что подтверждается малыми факторами недостоверности  $R_B$  и  $R_{wp}$  (Табл.3). На рис.2 показана структура низкотемпературной

кубической фазы кристалла  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$ . Характерные длины связей и валентные углы представлены в табл.4, и имеют нормальные значения. В частности, они показывают, что полиэдры  $\text{SnF}_6$  являются почти идеальными октаэдрами с одинаковыми длинами связей Sn-F и углами F-Sn-F, лишь немного отличающимися от  $90^\circ$ . В отличие от фазы Pm-3m в структуре кубической фазы Pa-3 при  $+90^\circ\text{C}$  все октаэдры  $\text{SnF}_6$  упорядочены, что является важным фактом с точки зрения фазовых переходов. Лишь при температуре выше  $100^\circ\text{C}$  сверхструктурные пики исчезают, что указывает на фазовый переход из фазы Pa-3 в фазу Pm-3m, в которой октаэдры  $\text{SnF}_6$  разупорядочены.

Таблица 2. Координаты атома и изотропные тепловые параметра  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  при  $+90^\circ\text{C}$ . В скобках указаны стандартные отклонения.

Атом	x	y	z	$B_{\text{iso}}$
Sn1	0	0	0	1.9 (2)
Sn2	0.5	0	0	2.3 (2)
F1	0.3921 (9)	0.9032 (10)	0.4429 (7)	5.2 (2)
F2	0.4765 (10)	0.9598 (9)	0.1433 (8)	5.2 (2)
F3	0.2349 (6)	0.2349 (6)	0.2349 (6)	5.2 (2)
N	0.4875 (14)	0.7468 (16)	0.7592 (14)	5.1 (4)

Таблица 3. Параметры сбора данных структуры кристалла  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  при  $+90^\circ\text{C}$

Сингония	Кубическая сингония	Число формульных единиц в ячейке Z	8
Пространственная группа	$Pa\bar{3}$	Факторы недостоверности $R_{\text{wp}}, R_{\text{B}} \%$	13,50 9,27
Параметр ячейки a, Å	12,0928(2)	Дифрактометр	D8 -ADVANCE
Объём ячейки V, Å <sup>3</sup>	1768,400(5)	Излучение	Cu Kα

### Заключение

По данным рентгеновского эксперимента от порошкового образца определена структура низкотемпературной кубической фазы кристалла  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$ . Анализ погасаний рефлексов на рентгенограмме и уточнение структуры кристалла по методу Ритвельда, позволили надежно установить пространственную группу Pa-3, параметры кубической ячейки ( $a = 12,0928(2) \text{ \AA}$ ,  $Z=8$ ) и отсутствие разупорядочения октаэдров  $\text{SnF}_6$  в этой фазе. Структура состоит из практически правильных октаэдрических групп  $\text{SnF}_6$ , которые связаны между собой водородными связями через атомы водорода аммонийных тетраэдрических групп  $\text{NH}_4$ .

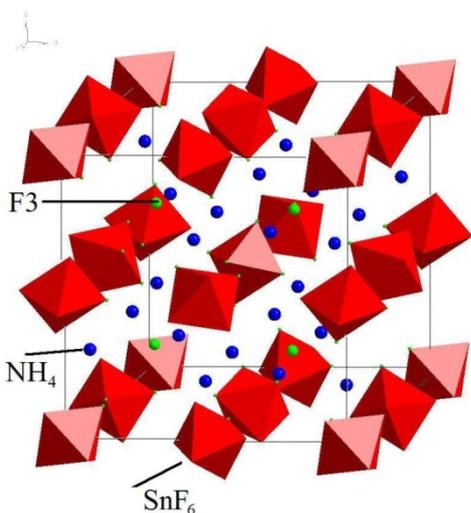


Рис. 2. Структура кристалла  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  при  $+90^\circ\text{C}$



Таблица 4. Основные длины связей (Å) и валентные углы(°) в структуре кристалла  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$  при +90 °С

Sn1—F1 <sup>i</sup>	1.890 (11)	Sn2—F2 <sup>ii</sup>	1.828 (12)
F1 <sup>i</sup> —Sn1—F1 <sup>iii</sup>	93.0 (5)	F2 <sup>ii</sup> —Sn2—F2 <sup>iv</sup>	86.4 (5)

Элементы симметрии: (i)  $-x+1/2, -y+1, z-1/2$ ; (ii)  $x, y-1, z$ ; (iii)  $-y+1, z-1/2, -x+1/2$ ; (iv)  $-y+3/2, -z, x-1/2$ .

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ Сибирскому федеральному университету на выполнение НИР в 2014 году (Задание № 3.2534.2014/К).

#### Список литературы

1. Hofman, B. Neue Metallfluoride  $\text{A}_3\text{MF}_7$  mit  $\text{M} = \text{Si}, \text{Ti}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Ti}$  und  $\text{A} = \text{Rb}, \text{Cs}$ . Z. Anorg. Allg. Chem. Vol. 458 (1979) pp.151-162.
2. Plitzko, C. Kristallstruktur von  $(\text{NH}_4)_3\text{SnF}_7$ : Ein Doppelsalz gemaess  $(\text{NH}_4)_3(\text{SnF}_6)\text{F}$  und kein  $(\text{NH}_4)_4\text{SnF}_8$ . Z. Anorg. Allg. Chem. 623 (1997) 1347–1348.
3. Molokeeв, M.S. Reconstructive phase transition in  $(\text{NH}_4)_3\text{TiF}_7$  accompanied by the ordering of  $\text{TiF}_6$  octahedra / M.S. Molokeeв, S.V. Misjul, I.N. Flerov, N.M. Laptash // Acta Cryst. B, Vol.70, issue 6 (2014) pp.924-931.
4. Bruker AXS TOPAS V4: General profile and structure analysis software for powder diffraction data. – User’s Manual. Bruker AXS, Karlsruhe, Germany. 2008.



## ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ТРОЙНЫХ МОЛИБДАТОВ $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$ ( $\text{La} = \text{Dy}, \text{Tb}$ и $\text{Gd}$ )

Тачеева Н.Н.

научные руководители д-р.физ.-мат. наук, проф. Мисюль С.В., канд.физ.-мат.наук, ст.науч. сотр. Молокеев М.С.

*Институт инженерной физики и радиоэлектроники Сибирского Федерального Университета*

По данным рентгеновского эксперимента от порошковых образцов определены структуры кристаллов тройных молибдатов  $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$  ( $\text{La} = \text{Dy}, \text{Tb}$  и  $\text{Gd}$ ) при комнатной температуре. Уточнение профильных и структурных параметров проводилось по методике, реализованной в программе TOPAS 4.2, ориентированной на минимизацию по всему профилю рентгенограммы разности между значениями производной от рассчитанной и экспериментальной интенсивностям рентгеновского излучения. Нецентросимметричная пространственная группа  $\text{Pba2}$  позволяет считать такие кристаллы перспективными в качестве сред для наноэлектроники.

### Введение

Кристаллы молибдатов представляют обширный класс материалов, имеющих широкое применение в лазерной физике и акустооптике. Одним из основных направлений современного материаловедения является поиск и создание материалов с заданными свойствами. Физико-химический анализ систем, получение новых соединений, изучение их структуры, свойств, нахождение взаимосвязи между ними лежат в основе решения этой задачи. В решении таких задач тройные молибдаты занимают одно из главных мест, так как многие из них известны в качестве функциональных материалов с лазерными, сегнетоактивными, люминесцентными и другими физическими свойствами, важными в современной технике [1]. В первую очередь это относится к двойным молибдатам щелочных и редкоземельных элементов, тройным молибдатам одно-двух-трехвалентных и одно-одно-трехвалентных элементов, интенсивно изучавшихся с середины 60-х годов [1].

Однако кристаллические структуры большинства тройных молибдатов по прежнему неизвестны или слабо изучены. Можно говорить только о некоторых из тройных молибдатов, чьи структуры определены с достаточной для современного приложения точностью. Поэтому паспортизация и определение структур соединений из этого ряда в настоящее время актуальны.

Цель настоящего исследования заключалась в определении структурных характеристик (симметрия, параметры кристаллических ячеек) и структур (координат и тепловых параметров атомов) сравнительно недавно синтезированных и пока неисследованных тройных молибдатов  $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$ , в которых ион  $\text{La}$  последовательно замещался  $\text{Dy}$ ,  $\text{Tb}$  и  $\text{Gd}$ . Структуры всех трех кристаллов определялись при комнатной температуре.

### 1. Экспериментальные результаты

Кристаллы  $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$  ( $\text{La} = \text{Dy}, \text{Tb}$  и  $\text{Gd}$ ) выращены и любезно предоставлены в виде порошков для рентгеноструктурных исследований сотрудником Байкальского института природопользования СО РАН (г. Улан-Удэ) Чимитовой О.Д.

Рентгенограммы при комнатной температуре всех трех молибдатов получены на порошковом дифрактометре, Bruker D8 Advance, в геометрии Брэгга-Брентано с установленным на гониометре линейным детектором Vantec ( $\text{CuK}\alpha$  - излучение). Для индентирования рентгенограмм использовалась широко распространённая



математическая программа ITO. По результатам, полученных в ходе индиферирования рентгенограмм  $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$  (La - Dy, Tb и Gd) и, следуя погасаниям рентгеновских рефлексов [2], определены пространственные группы и параметры кристаллических ячеек (см. таблицу 1). Все исследованные кристаллы при комнатной температуре имеют одну и ту же симметрию ячеек с близкими параметрами (см. таблицу 1).

Таблица 1. Основные структурные характеристики тройных молибдатов  $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$  (La - Dy, Tb и Gd) при  $T = 293\text{K}$ . Пространственная группа  $\text{Pba2}$  ( $Z=4$ )

Кристалл	Параметры кристаллической ячейки (Å)	Объем кристаллической ячейки $V(\text{Å}^3)$	Профильный фактор недоверности $R_p$ (%)	Брэгговский фактор недоверности $R_w$ (%)
$\text{Dy}_2(\text{MoO}_4)_3$	a=10,327, b=10,354, c=10,614	1135,267	1,573	1,070
$\text{Tb}_2(\text{MoO}_4)_3$	a=10,384, b=10,353, c=10,656	1145,809	2,018	1,079
$\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$	a=10,391, b=10,422, c=10,702	1159,181	1,633	0,987

## 2. Уточнение структур кристаллов $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$ (La - Dy, Tb и Gd)

Уточнение профильных параметров, координат и изотропных тепловых характеристик атомов структур молибдатов проводилось по методике, реализованной в комплексе программ TOPAS 4.2 [3], ориентированной на минимизацию по всему профилю рентгенограммы разности между значениями производной от рассчитанной и экспериментальной интенсивностей рентгеновского излучения. На рисунке 1 приведены экспериментальная, теоретическая и разностная рентгенограммы  $\text{Dy}_2(\text{MoO}_4)_3$ . Рентгенограммы  $\text{Tb}_2(\text{MoO}_4)_3$  и  $\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$  имеют подобный вид и, поэтому здесь не приводятся. Судя по факторам недоверности (таблица 1), все рентгенограммы свидетельствуют о хорошем качестве проведенного уточнения.

Результаты уточнения структур исследуемых тройных молибдатов показали изоструктурность кристаллов  $\text{La}_2(\text{MoO}_4)_3$  (La - Dy, Tb и Gd), поэтому здесь и далее приводятся данные по уточнению структуры только для  $\text{Dy}_2(\text{MoO}_4)_3$ . Координаты и изотропные тепловые параметры атомов кристалла  $\text{Dy}_2(\text{MoO}_4)_3$  собраны в таблице 2. Кристаллическая структура  $\text{Dy}_2(\text{MoO}_4)_3$  состоит из связанных между собой через вершины тетраэдров  $\text{MoO}_4$  и квадратных антипризм  $\text{DyO}_8$  (рис.2). Характерная черта исследованных тройных молибдатов является отсутствие в структуре центра инверсии, что делает их перспективными для практических применений в качестве активных сред.



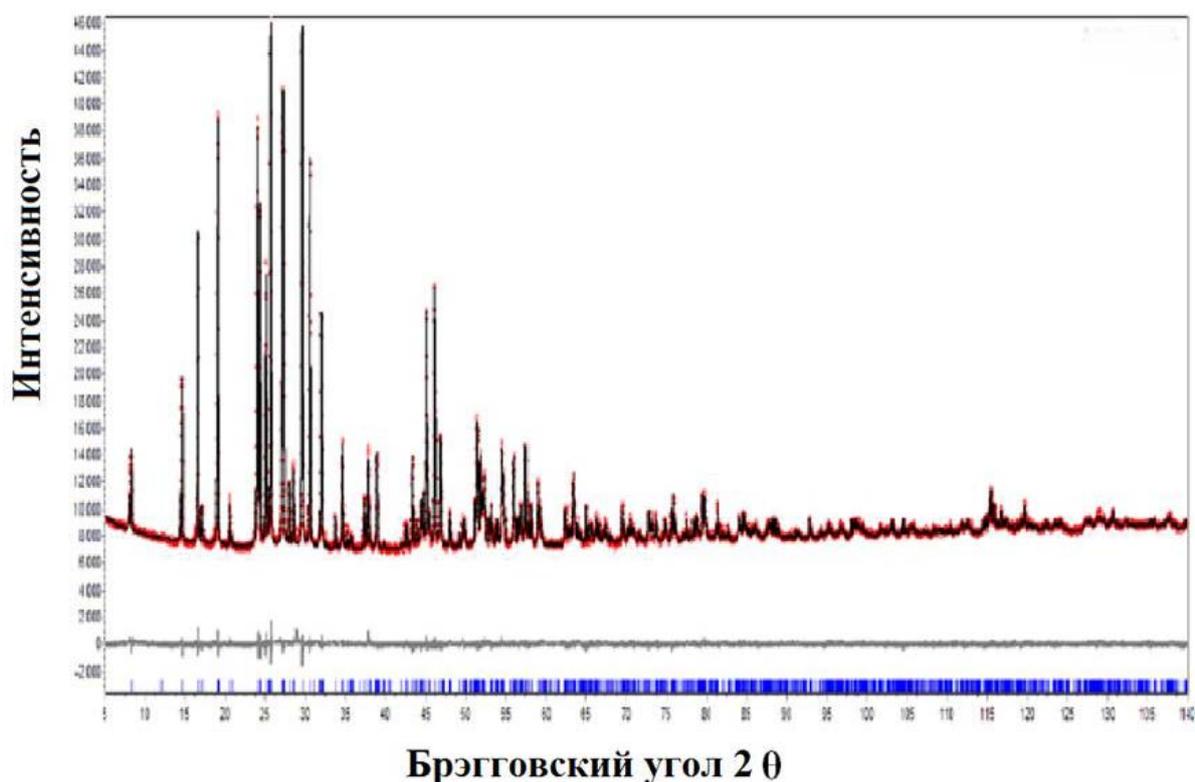


Рис. 1. Экспериментальная (красная линия), теоретическая (синяя линия) и разностная (черная линия) рентгенограммы кристалла  $Dy_2(MoO_4)_3$  при 293 K (CuK $\alpha$  - излучение)

Таблица 2. Координаты и изотропные тепловые параметры атомов кристалла  $Dy_2(MoO_4)_3$ . В скобках указаны стандартные отклонения

АТОМ	x	y	z	Biso*/Beq
Dy1	0.1872 (3)	0.5025 (11)	0.7359 (7)	1.00 (11)
Dy2	0.4982 (9)	0.3131 (3)	0.2606 (7)	1.00 (11)
Mo1	0.2067 (5)	0.5003 (14)	0.3531 (8)	1.00 (13)
Mo2	0.9976 (13)	0.2035 (4)	0.6372 (8)	1.00 (13)
Mo3	0.2424 (10)	0.2548 (13)	0	1.00 (10)
O1	0.126 (4)	0.642 (4)	0.300 (4)	0.50 (2)
O2	0.421 (3)	0.906 (3)	0.274 (4)	0.50 (2)
O3	0.187 (4)	0.685 (3)	0.180 (3)	0.50 (2)
O4	0.712 (3)	0.054 (3)	0.471 (3)	0.50 (2)
O5	0.296 (7)	0.133 (7)	0.899 (6)	0.50 (2)
O6	0.382 (3)	0.497 (9)	0.298 (2)	0.50 (2)
O7	0.665 (4)	0.121 (5)	0.916 (5)	0.50 (2)
O8	0.311 (3)	0.008 (5)	0.528 (3)	0.50 (2)
O9	0.305 (8)	0.147 (6)	0.926 (6)	0.50 (2)
O10	0.519 (5)	0.349 (3)	0.171 (3)	0.50 (2)
O11	0.362 (4)	0.334 (3)	0.098 (4)	0.50 (2)
O12	0.158 (3)	0.410 (3)	0.663 (3)	0.50 (2)

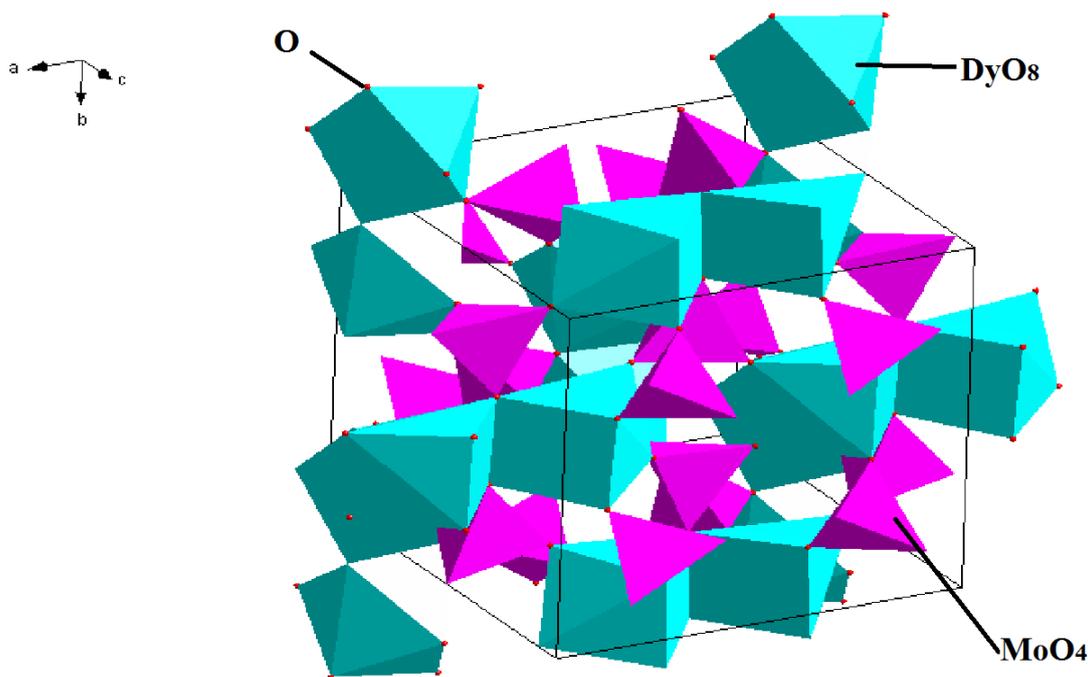


Рис. 2. Кристаллическая структура  $Dy_2(MoO_4)_3$ . Показаны тетраэдры  $MoO_4$  ( $Mo$  - в центре тетраэдра) и квадратные антипризмы  $DyO_8$  ( $Dy$  - в центре антипризмы)

### 3. Заключение

Методом рентгеновской порошковой дифракции определены структуры новых соединений тройных молибдатов  $La_2(MoO_4)_3$  ( $La$  -  $Dy$ ,  $Tb$  и  $Gd$ ) при комнатной температуре. Все исследованные кристаллы имеют один и тот же каркасный тип структуры, нецентросимметричную группу  $Pba2$  и близкие параметры ромбической ячейки.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ Сибирскому федеральному университету на выполнение НИР в 2014 году (Задание № 3.2534.2014/К).

### Список литературы

1. Трунов, В.К. Кристаллохимия и свойства двойных молибдатов и вольфраматов / В.К.Трунов, В.А.Ефремов, Ю.А.Великодный // Ленинград, Изд-во Наука, Ленинградское отделение. -1986. -174 с.
2. International Tables for Crystallography. -V.A. -Space-Group Symmetry/ Edited by Theo Hahn // Springer. -2005. -920 p.
3. Bruker (2008b). TOPAS.Version 4. - Bruker AXS. - Karlsruhe. - Germany.





УДК 538.945

## ИССЛЕДОВАНИЕ СПИН-РЕЗОНАНСНОГО ПИКА В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ СОСТОЯНИИ ПНИКТИДОВ ЖЕЛЕЗА

Шестаков В.А.

научный руководитель канд. физ.-мат. наук Коршунов М.М.

*Сибирский федеральный университет*

Был рассмотрен спиновый отклик в сверхпроводящем состоянии в пниктидах железа. В четырёхзонной модели был получен спин-резонансный пик на частоте  $\omega_s$  в мнимой части спиновой восприимчивости для  $s_{\pm}$  симметрии параметра порядка (изображён чёрной сплошной линией на рисунке 1), аналогично работе [1].  $s_{\pm}$  параметр порядка имеет разные знаки на различных волновых векторах. Благодаря этому различию в знаках, факторы когерентности  $1 \pm (\xi_k^{\mu} \xi_{k+q}^{\nu} + \Delta_k^{\dagger \mu} \Delta_{k+q}^{\nu}) / (E_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu})$  в выражении для мнимой части спиновой восприимчивости без учёта взаимодействия, см. уравнение (1), возникает скачок на частоте  $\omega_s$ , который, в свою очередь, при учёте взаимодействия в приближении случайных фаз (Random Phase Approximation – RPA) приводит к возникновению спин-резонансного пика. Для выполнения расчётов параметр  $\Gamma$ , который в точной формулировке стремится к нулю, был выбран численно малым.

$$\begin{aligned}
 \text{Im } \chi^{\mu\nu}(q, \Omega) = & \\
 = -\frac{\Gamma}{4} \sum_k & \left( 1 - \frac{\xi_k^{\mu} \xi_{k+q}^{\nu} + \Delta_k^{\dagger \mu} \Delta_{k+q}^{\nu}}{E_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu}} \right) \left( \frac{1 - n_f(E_k^{\mu}) - n_f(E_{k+q}^{\nu})}{(E_k^{\mu} + E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} + \frac{n_f(E_k^{\mu}) + n_f(E_{k+q}^{\nu})}{(-E_k^{\mu} - E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} \right) - \\
 + \left( 1 + \frac{\xi_k^{\mu} \xi_{k+q}^{\nu} + \Delta_k^{\dagger \mu} \Delta_{k+q}^{\nu}}{E_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu}} \right) & \left( \frac{n_f(E_{k+q}^{\nu}) - n_f(E_k^{\mu})}{(E_k^{\mu} - E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} + \frac{n_f(E_k^{\mu}) - n_f(E_{k+q}^{\nu})}{(-E_k^{\mu} + E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} \right) + \\
 + \left( \frac{\xi_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu} - E_k^{\mu} \xi_{k+q}^{\nu}}{E_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu}} \right) & \left( \frac{1 - n_f(E_k^{\mu}) - n_f(E_{k+q}^{\nu})}{(E_k^{\mu} + E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} + \frac{n_f(E_k^{\mu}) + n_f(E_{k+q}^{\nu}) - 1}{(-E_k^{\mu} - E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} \right) + \\
 + \left( \frac{\xi_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu} + E_k^{\mu} \xi_{k+q}^{\nu}}{E_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu}} \right) & \left( \frac{n_f(E_{k+q}^{\nu}) - n_f(E_k^{\mu})}{(E_k^{\mu} - E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} - \frac{n_f(E_k^{\mu}) - n_f(E_{k+q}^{\nu})}{(-E_k^{\mu} + E_{k+q}^{\nu} + \Omega)^2 + \Gamma^2} \right). \quad 1)
 \end{aligned}$$

Как известно, все вещества содержат некоторую долю беспорядка, которая может быть внесена как примесями, так и дефектами кристаллической структуры. Поэтому при сравнении результатов теории с экспериментами по нейтронному рассеянию, где спин-резонансный пик и наблюдается [2,3], необходимо принимать во внимание рассеяние на примесях. Для учёта влияния примесей была добавлена статическая собственно-энергетическая часть  $\text{Im}\Sigma$ , которая в функцию Грина и в выражение для восприимчивости входит как перенормировка параметра  $\Gamma$ . Собственно-энергетическая часть будет увеличиваться пропорционально концентрации примесей, поэтому путём увеличения параметра  $\Gamma$  мы симулируем увеличение беспорядка в системе. Такое при-



ближение позволяет качественно оценить характер рассеяния на примесях без учёта частотной и импульсной зависимостей.

Добавление статической собственно-энергетической части привело к существенному увеличению ширины спинового резонанса (рисунок 1) и увеличению частоты  $\omega_s$  (рисунок 2). Причём, как показывают рисунки 1 и 2, чем выше концентрация примесей, тем сильнее сдвигается частота спинового резонанса в сторону больших энергий.

Полученные данные хорошо согласуются с результатами расчётов в более простой двузонной модели [4], в которой, однако, более детально рассматривается рассеяние на примесях.

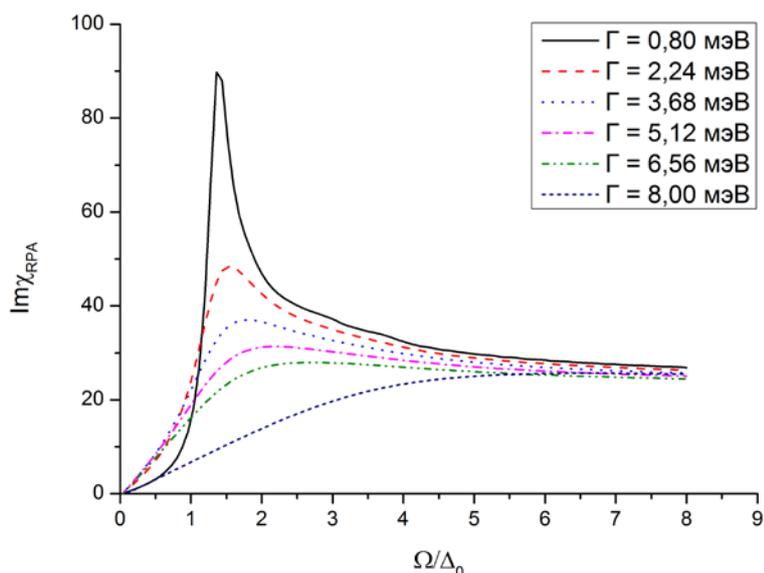
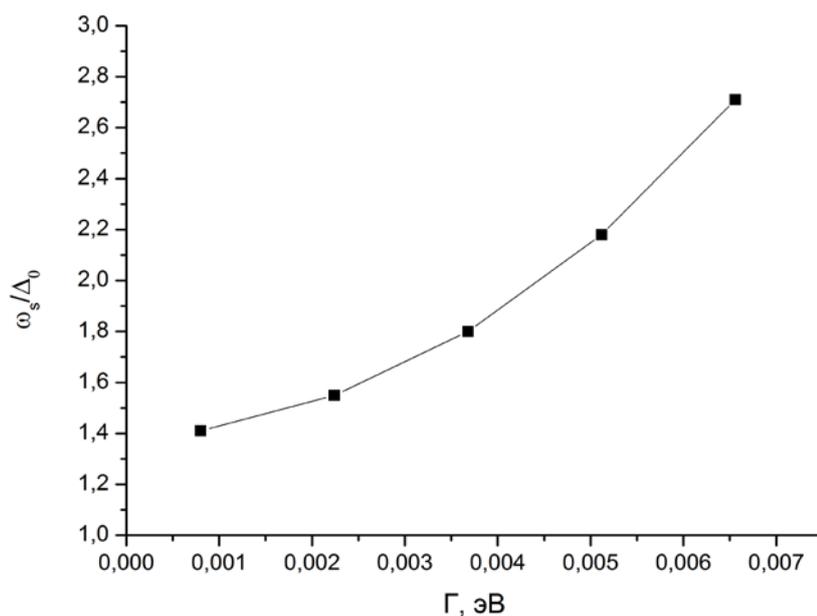


Рисунок 1. Зависимость ширины спин-резонансного пика от наличия примесей



*Рисунок 2. Смещение частоты спинового резонанса  $\omega_s$  с увеличением концентрации примесей*

### Список литературы

1. Korshunov, M. M. Theory of magnetic excitations in iron-based layered superconductors / M. M. Korshunov, I. Eremin // Phys. Rev. B. 2008. – Vol. 78 – no. 14 – P. 140509.
2. Inosov, D. S. Normal-state spin dynamics and temperature-dependent spin-resonance energy in optimally doped BaFe<sub>1.85</sub>Co<sub>0.15</sub>As<sub>2</sub> / D. S. Inosov et al // Nature Physics. 2010. – № 6. – p. 178 – 181.
3. Christianson, A. D. Unconventional superconductivity in Ba<sub>0.6</sub>K<sub>0.4</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> from inelastic neutron scattering / A. D. Christianson et al // Nature. 2008. – № 456. – p. 930 – 932
4. Maiti, S. Effect of nodes, ellipticity, and impurities on the spin resonance in iron-based superconductors / S. Maiti, J. Knolle, I. Eremin, A.V. Chubukov // Physical Review B. 2011. – № 84. – p. 144524-1 – 144524-12.



## ТЕРМОДИНАМИКА КВАЗИДВУМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

$La_2CuO_4$

Юргенсон К.А.,

научный руководитель д-р физ.-мат. наук Овчинников С.Г.

*Сибирский федеральный университет*

Исследование низкоразмерного магнетизма важная задача современно физики твердого тела. Экспериментальный интерес к этой теме связан с необычными магнитными свойствами слоистых перовскитов, органических соединений, ферромагнитных пленок, мультислоев и поверхностей. В последнее время интерес к низкоразмерным соединениям возрос в связи с исследованиями магнитных свойств медь-кислородных плоскостей в высокотемпературных сверхпроводниках, в том числе, на основе соединения  $La_2CuO_4$

В данной работе рассматривается система, состоящая из двух двумерных магнитных плоскостей. Антиферромагнитный порядок стабилизируется благодаря обменно-взаимодействию между плоскостями.

В качестве теоретической модели взаимодействия используется модель Гейзенберга:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i, \delta=(\delta_{\perp}, \delta_{\parallel})} S_i S_{i+\delta}$$

Где  $J$ -обменный интеграл в плоскости,  $J > 0$  для ферромагнетика,  $J < 0$  для антиферромагнетика.  $\delta_{\perp}$  и  $\delta_{\parallel}$  обозначают число ближайших соседей в пределах одного слоя и между слоями.

Для описания спин-волновых возбуждений используется переход от спиновых операторов к бозонным с помощью представления Барьяхтара-Криворучко-Яблонского:

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \sqrt{2S} b_i^- \\ S_i^z &= S - b_i^+ b_i^- - (2S + 1) c_i^+ c_i^- \\ S_i^- &= \sqrt{2S} \left( b_i^+ - \frac{1}{2S} b_i^+ b_i^+ b_i^- \right) - \frac{2(2S + 1)}{\sqrt{2S}} b_i^+ c_i^+ c_i^- \end{aligned}$$

Где помимо бозонных операторов включены вспомогательные псевдофермионные операторы, учитывающее взаимодействие спиновых волн.

Используя технику уравнений движения для двухвременных функций Грина нами получены выражения для спектра элементарных возбуждений и параметров порядка.

Они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \gamma &= \bar{S} + \sum_k \frac{\Gamma_k}{2E_k} \cos k_x \coth \frac{E_k}{2T} \\ \gamma' &= \bar{S} + \sum_k \frac{\Gamma_k}{2E_k} \cos k_z \coth \frac{E_k}{2T} \\ \bar{S} &= S + \frac{1}{2} - \sum_k \frac{\Gamma_k - \mu}{2E_k} \coth \frac{E_k}{2T} \end{aligned}$$



$\bar{S}$ -средняя намагниченность подрешетки,  $\gamma$  параметры порядка.

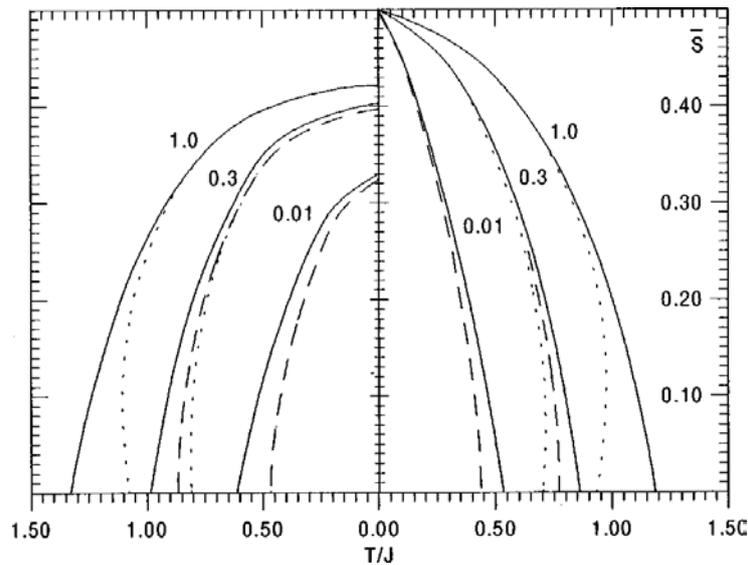
$$\Gamma_k = 2S[\gamma|J|(\cos k_x + \cos k_y) + \gamma'|J'| \cos k_z]$$

$J$  и  $J'$  обменные интегралы внутри плоскости и между плоскостями соответственно.

Спектр элементарных возбуждений имеет вид:

$$E_k = \sqrt{[(\Gamma_{k=0} + \mu)^2 - \Gamma_k^2]}$$

Ниже представлены результаты вычисления средней намагниченности для ферро и антиферромагнетика.



Дальнейшие исследования предполагают введение внешнего магнитного поля и допирования. Актуальность данного исследования состоит в том, что спиновые корреляционные функции в  $La_2CuO_4$  влияют на электронную структуру. Понимание же электронной структуры играет решающую роль, как для фундаментальных исследований, так и для практического применения сверхпроводников

#### Список литературы

- 1.Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма 2-е изд. (М:Наука,1975)
- 2.Irkhin V .Yu, Katanin A. A, Katsnelson M. I Phys.Rev.B 60 1082 (1999)
- 3.Катанин А А, Ирхин В Ю УФН 177 639 (2007)

